

307.226

IV

15
1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

2

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Iyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KONDENZÁLT RENDSZEREK MIKRODINAMIKÁJÁNAK KÍSÉRLETI VIZSGÁLATA NEUTRONOKKAL*

BATA LAJOS

Központi Fizikai Kutató Intézet

Bevezetés

A különböző sugárzásokat régóta használják az anyag tulajdonságainak felderítésére. Ezek közül egyre kiemelkedőbb helyet foglalnak el a termikus neutronok. Ugyanis a neutron energiája és hullámhossza között a

$$E = \frac{0,0818}{\lambda^2} \text{ eV} \quad \text{vagy} \quad \lambda = \frac{0,286}{\sqrt{E(\text{eV})}} \text{ \AA} \quad (1)$$

összefüggés áll fenn. A röntgen vagy fénysugár kvantumoknál pedig a

$$\hbar\omega = \frac{12,34}{\lambda(\text{\AA})} \text{ KeV}$$

összefüggés érvényes. A termikus atomreaktor csatornáiból, vagy általánosabban egy szobahőmérsékletű moderátorból kilépő neutronok energia eloszlásának maximuma $\sim 0,0253$ eV. A hozzátartozó hullámhossz $\lambda = 1,81$ \AA. Tehát a termikus neutronok energiái és impulzusai a kondenzált rendszerekre jellemző energiákkal és impulzusokkal megegyeznek. Röntgen sugaraknál az ilyen hullámhosszú kvantumok energiája 6,92 KeV. Fénysugaraknál az ilyen energiájú kvantumokhoz tartozó hullámhossz $\lambda \sim 5 \cdot 10^5$ \AA = 50 μ . Ez a magyarázata annak, hogy a neutronokat egyre növekvő számú területen használják az anyag tulajdonságainak felderítésére.

Az eddig használt vagy tervbevert területek a következők:

1. A molekulák rotációs mozgásának vizsgálata szilárd testekben és folyadékokban.
2. Atomok, molekulák diffúziós mozgásának vizsgálata folyadékokban.
3. Szilárd testek és folyadékok frekvencia spektrumának vizsgálata különböző hőmérsékleteken.
4. Egykristályok fonon diszperziós görbéjének megállapítása.
5. A spinhullámok diszperziós görbéjének megállapítása ferro- és antiferromágneses anyagokban.
6. Vonalszélesség és eltolódás mérése, élettartam és anharmonikus effektusok vizsgálata.
7. Kritikus szórás vizsgálata mágneses anyagokban és folyadékokban.
8. Energia nívók felhasadásának mérése paramágneses sókban.

* A dolgozat a Szerzőnek a Szilárdtestfizikai Laboratórium téli iskoláján elhangzott előadásának anyaga.

9. Mágneses momentumok térbeli eloszlásának mérése.

10. Atomi és mágneses szerkezetek megállapítása stb.

Ebben a dolgozatban az első 6 pontban felsorolt fizikai feladat vizsgálatának lehetséges módszereiről lesz szó.

A kísérleti technika alapfeladata, hogy monoenergiás neutron nyálábot bocsátson az anyag mintára és mérje a mintán szórt neutronok energia eloszlását, vagy mérje egy meghatározott energia vagy impulzus cserénél az anyagmintára jellemző paramétereket.

Ezeket a méréseket a következő berendezésekkel végezhetjük el:

1. Fázisban forgó szagatókat használó impulzus üzemi spektrométerrel.

2. Polikristályos neutron szűrővel kombinált görbült (vagy egyenes) résű szagatóval.

3. Háromtengelyű kristály spektrométerrel.

4. Forgó kristályos repülési idő spektrométerrel.

5. Berilium detektor vagy inverz szűrő módszerrel.

6. Különböző hibrid berendezésekkel.

Itt mindjárt két kérdés merül fel.

Melyik kísérleti berendezés milyen fizikai vizsgálatra alkalmas? Egy meghatározott fizikai vizsgálatra melyik a legalkalmasabb berendezés?

Az első kérdésre általánosan könnyű felelni. A mérések az anyagok kétszeres differenciális hatáskeresztmetszetét szolgáltatják. *Van Hove* [1] megmutatta, hogy ezt két tényező határozza meg. Az egyik a sugárzás fajtájától, a másik a szóró rendszer természetétől, atomjainak mozgásától függ.

Az anyagminta kétszer differenciális hatáskeresztmetszete ugyanis

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega} = \left(\frac{\sigma_b}{4\pi} \frac{k}{k_0} \right) S(Q, \omega)$$

ahol

$$S(Q, \omega) = \frac{1}{2\pi} \int G(\vec{r}, t) e^{i(\vec{Q}\vec{r} - \omega t)} d\vec{r} dt$$

Az első rész, — k/k_0 a mintán szórt és a mintára eső neutronok hullámvektorai abszolút értékének hányadosa, σ_b a kötött atom szórási hatáskeresztmetszete, — a neutronoktól függ.

$S(Q, \omega)$, melyet szórás függvénynek neveznek, csak a szórási folyamat során előforduló

$$\hbar Q = \hbar k - \hbar k_0 = 2\pi\tau - q \quad \text{impulzus}$$

és

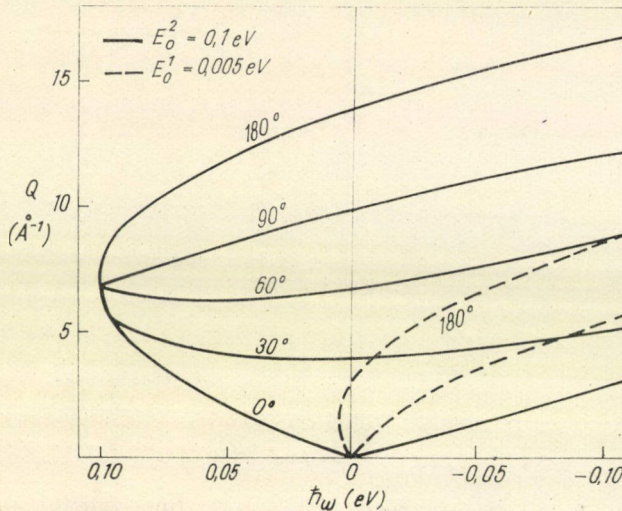
$$\hbar\omega = E_0 - E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_0^2 - k^2) \quad \text{energia}$$

cseréktől függ. \hbar a Planck állandó, E_0 , ill. E a neutronok energiája a szórás előtt, ill. a szórás után, m a neutron tömege.

Tehát ahhoz, hogy egy anyagról neutronszerelés kísérletekkel a legteljesebb információt összegyűjtsük, a kísérleti berendezésünkkel megfelelő nagy $Q - \omega$ tartományt kell előállítani, illetve elég nagy $Q - \omega$ tartományban kell megállapítanunk

a szórásfüggvényt. Hogy a felsorolt konkrét vizsgálatoknál, mekkora $Q - \omega$ teret kell elfednünk azt még II.-ben látni fogjuk. Általában azt mondhatjuk, hogy a

$$0,3 \text{ \AA}^{-1} \leq Q \leq 10 \text{ \AA}^{-1} \\ 10^{-4} \leq \hbar\omega \leq 10^{-1} \text{ eV}$$



1. ábra. A Q hullámhossz változással mérhető $\hbar\omega$ energia csere különböző szórási szögeknél és mintára eső energiánál

tartományt kell lefedni. A Q vektor hossza a

$$Q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 + E - 2\sqrt{EE_0} \cos \varphi)$$

egyenlettel adható meg. Egy meghatározott E_0 -nál vagy E -nél, a különböző $\hbar\omega$ energiacserékhez és φ szórási szögekhez tartozó $Q - k$ meghatározhatók. Két E_0 (ill. E) energiánál ezt az 1. ábrán tüntettük fel. Látható, hogy kis energiájú neutronoknál ez a tér igen korlátozott, nagy energiájú neutronokkal sokkal nagyobb tartomány fedhető le. Ebből az ábrából úgy tűnik, hogy kis energiájú neutronokkal főleg csak a szórásfüggvény $S(Q, -\omega)$ tartománya fedhető le. Valójában ez a tartomány kiterjeszthető, mert az energia nyereséhez, vagy veszteséhez tartozó szórás függvények között a mikroszkópikus reverzibilitás (a mikroszkópikus egyensúly feltétele) az

$$S(Q, -\omega) = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{K_B T}\right) S(Q, \omega)$$

összefüggést szolgáltatja. Így $S(Q, \omega)$ is meghatározható egy nagyobb tartományban.

A konkrét kísérleti berendezések használhatóságára tehát itt egy korlátot állapítottunk meg.

A második kérdésre, tehát hogy egy konkrét kísérlethez, melyik típusú berendezés a jobb, konkrét választ nem adhatunk. Ezt több tényező befolyásolja: felbontás, intenzitás, az adatok összegyűjtésének gyorsasága, hely a laboratóriumban. Ezekhez minden gyakorlati esetben egyéb tényezők is járulnak, rendelkezésre álló pénz, a berendezés építéséhez rendelkezésre álló tervező és kivitelező apparátus tapasztalatainak skálája, stb. mindezt mennyiségileg analizálni aligha lehet.

A további vizsgálatunkat két részre bontjuk. Az I. részben megismerkedünk a kísérleti berendezések alapegységeivel. A II. részben vázolt fizikai problémák kísérleti vizsgálatának módjaival. Itt válaszolunk arra, hogy melyik berendezés típus, melyik fizikai vizsgálatra a legalkalmasabb.

I. A kísérleti vizsgálatok eszközei

Neutron forrásul többnyire folytonos üzemű atomreaktorokat használnak. De végeznek ilyen típusú méréseket impulzus üzemű neutron forrásoknál is; gyorsítók, impulzus üzemű reaktor stb. Az atomreaktorok csatornáin hasadási, lelassulási- és Maxwell eloszlással közelíthető termikus neutronok lépnek ki. A reaktor csatornáiban a mintegy 10 MeV-tól egészen 1 meV-ig találhatunk neutronokat.

A 0,005 eV-nál kisebb energiájúakat hideg, a

0,1–0,005 eV tartományba esőket termikusaknak, a

0,1–0,5 eV-ig meleg

0,5 fölöttieket egyszerűen epitermikusaknak nevezik.

Egy adott kísérletnél a kívánt energiájú neutronokon kívül előforduló nagyobb energiájú neutronokat gyorsaknak hívjuk. Mindegyik tartománynak meg van a használhatósági területe. A 0,1 eV-nál kisebb energiájú neutronok eloszlását Maxwell-eloszlással írhatjuk le. Így azon neutronok számát, melyek hullámhossza λ és $\lambda + d\lambda$ sávba esik az

$$n_{\lambda} d\lambda = \frac{2N_1}{\lambda} \left(\frac{E}{K_B T} \right)^2 e^{-\frac{E}{K_B T}} d\lambda$$

összefüggés adja meg.

Ahol N_1 a sec-ként kilépő neutronok száma, λ az E energiájú neutronok hullámhossza. A hideg neutronok energiatartományában a Maxwell-eloszlást

$$n(\lambda) d\lambda = 4\lambda_0^4 \lambda^{-5} \quad \text{azaz} \quad n(E) dE = E dE$$

képletekkel közelíthetjük.

Ilyen neutron spektrumból kell előállítani egy kívánt tartományban monokromatikus neutronokat. Ez azt jelenti elsődleges feladattá válik, hogy az illető tartományban eső neutronok intenzitását növeljük oly módon, hogy a nem kívánt tartományba eső neutronok intenzitása lehetőleg ne nőjön.

A Maxwell tartományba eső neutronok intenzitásának növelésére a moderátor hőmérsékletének változtatásával nyílik lehetőség. A hideg neutron tartományban, pl. a moderátor hűtésével tolhatjuk el a Maxwell eloszlás maximumát.

A kísérleti berendezések elemeit két részre oszthatjuk:

I.a. Monokromátorok.

I.b. Analizátorok.

I.a. Monokromátorok

1. Egykristály monokromátor egység

A reaktorból kilépő neutronnyaláb kollimátoron halad keresztül (általában $0,5^\circ$ – 1° -os kollimátorokat használnak). Az egykristályt valamely síkjával (pl. alumíniumnál az (111), berilliumnál az (110)) síkkal párhuzamosan metszik el. A megfelelő síkon szórt neutronnyaláb újabb kollimátoron keresztülhaladva esik az anyagmintára. Ha a neutronnyaláb Θ_M szögben esik az egykristály (h, k, l) síkra, akkor a Bragg-egyenlet szerint

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \Theta_M$$

a Θ_M szögbe szórt neutronok λ hullámhosszúak lesznek. A magasabb rendben ($n > 1$) reflektált neutronok száma nem nagy (a Maxwell spektrumban) ezek ellen egykristály szűrőkkel védekezünk. A $\Theta_M \pm d\Theta_M$ szögbe szórt neutronok tehát $\lambda \pm d\lambda = \lambda \pm 2d_{hkl} \cos \Theta_M d\Theta_M$ hullámhosszúak lesznek. $d\Theta_M$ -et a kollimátor határozza meg. Általános esetet véve $\Theta_M = 10^\circ$, $d_{hkl} = 3 \text{ \AA}$, így ha

$$\begin{aligned} d\Theta_M &= 0,5^\circ & \Delta\lambda &= 2d\lambda = 0,1 \text{ \AA} \\ &= 1^\circ & &= 0,2 \text{ \AA} \end{aligned}$$

$\lambda = 1,81 \text{ \AA}$ -nál a felbontásra 10% adódik. Ha a monokromátorra N_1 (kollimált) neutron esik, a monokromátor által reflektált neutronok teljes számát

$$N_2 = \frac{2N_2}{\lambda} \left(\frac{E}{K_B T} \right)^2 e^{-\frac{E}{K_B T}} 2d \cos \Theta \cdot R^\Theta$$

egyenlettel adhatjuk meg. Az integrálás reflexivitást a

$$R^\Theta = \frac{N_c \lambda^2 F}{\sin 2\Theta} \text{ th } (N_c \lambda t_0 / \sin \Theta)$$

egyenlettel adhatjuk meg. t_0 a kristály vastagsága. N_c az 1 cm^3 -ben levő egységcellák száma. [4]

Ha $\lambda = 1,81 \text{ \AA}$, azaz $E = K_B T$ energiájú neutronok intenzitás csökkenését vesszük

$$N_2 = \frac{2N_1}{e} \text{cth } \Theta R^\Theta = 2 \cdot 10^{-2} N_1$$

mivel $R^\Theta \sim 15' \cong 0,004$. Az (1)-et Bragg egyenletbe helyettesítve kapjuk a (h, k, l) síkon reflektált neutronok energiája és a beesés ill. reflektálás Θ_B szöge közötti összefüggést.

$$E = \frac{0,0818 n^2}{4d_{hkl}^2 \sin^2 \Theta_B} = \frac{K}{\sin^2 \Theta_B}$$

K egy adott kristálynál, és annak egy választott síkjára állandó.

A síkok között levő d_{hkl} távolság köbös tetragonális és ortorombos kristályoknál az

$$d_{hkl}^{-1} = \sqrt{\frac{h^2}{a_0^2} + \frac{k^2}{b_0^2} + \frac{l^2}{c_0^2}}$$

egyenlettel adható meg (a három tengely merőleges egymásra).

Hexagonális kristálnál (pl. Be) az atom síkok között levő távolság

$$d_{hkl} = 1 / \sqrt{\frac{4}{3a_0^2}(h^2 + k^2 + hk) + \frac{l^2}{c_0^2}}$$

egyenlettel fejezhető ki. (Be-nál pl. $a_0 = 2,2855 \text{ \AA}$ $c_0 = 3,5830 \text{ \AA}$, így

$$E = \frac{1,565 \cdot 10^{-2}}{\sin^2 \Theta} \text{ eV}$$

$5^\circ \leq \Theta \leq 15^\circ$ szögtartományban $2 \text{ eV} \rightarrow 0,2377 \text{ eV}$ energiájú neutronokat állíthatunk elő. 5° -nál kisebb szögeket a direkt nyaláb beszórása miatt nem használnak.)

2. Monokromáló neutron szaggatók

A monokromáló neutron szaggatók forgó résrendszerek. Tekintsünk először az egyszerűség kedvéért egy egyenes résű szaggatót. Ez pl. egy henger, melyben párhuzamosan neutronokat abszorbeáló falakat helyeztünk el. Forogjon ez a részekre merőleges irányban. Ezen a szaggatón az igen nagy energiájú neutronok áthatolhatnak, de elég kis energiájú neutronok nem, ilyen szaggató alulvágó szűrőként viselkedik. Tehát rajta csak

$$v_0 = \frac{R^2 \omega}{h} < v$$

sebességű neutronok haladhatnak keresztül. Párhuzamos neutronnyaláb $h/R\omega$ idő alatt halad rajta keresztül, így a szaggató nyitvatartási ideje

$$\tau_0 = \begin{cases} \frac{h}{R\omega} + \frac{\Delta\Theta_c}{\omega} & \text{ha } 4v_0 < v \\ 4\left(\sqrt{\frac{h}{\omega v}} + \frac{R}{v}\right) + \frac{\Delta\Theta_c}{\omega} & \text{ha } v_0 < v < 4v_0 \end{cases}$$

R a rotor sugara, h a rés szélesség. $\Delta\Theta_c$ a kollimáció szög divergenciája. ω a rotor forgáse sebessége. Egyenes résű szaggató minden fordulat alatt kétszer enged át, ezért a neutron impulzusok között levő időtartam π/ω . Görbültetésű neutron szaggatónál a nagy sebességű neutronok nem haladhatnak át akadály nélkül a résrendszeren. Alul és felül vágó szűrőként viselkedik. Azt a sebesség tartományt, melybe

eső neutronok egy w szögsebességgel forgó szaggatón áthaladhatnak

$$V_{\min} = \frac{2Rw}{\varphi + \frac{2h}{R}} < v < v_{\max} = \frac{2Rw}{\varphi - \frac{2h}{R}}$$

egyenlettel írhatjuk le. A φ szög jelentése a 2. ábrán látható. Egy ilyen szaggató a reaktor csatornán kijövő neutron spektrumból az 3. ábrán látható „monokromatizált neutron nyalábot” enged át. Ha figyelembe vesszük, hogy az áteresztési tartományba eső neutronokból nem ugyanannyi esett a szaggatóra, illetve ha a mért spektrumot állandó intenzitású neutronspektrumra korrigáljuk a szaggató transzmissziós függvényét kapjuk. A maximum helye a

$$v_0 = 2\varrho_0 w$$

sebességnél van. Mivel azonos görbületű réseket nehéz készíteni itt ϱ_0 a középső rés görbületi sugarát jelenti. A transzmissziós függvény félérték szélességét neutronok hullámhosszával és sebességével kifejezve

$$\left(v = \frac{\hbar 2\pi}{m\lambda} \right)$$

$$\Delta\lambda = 1,844 \cdot \varrho_0 h \lambda_0 / R^2$$

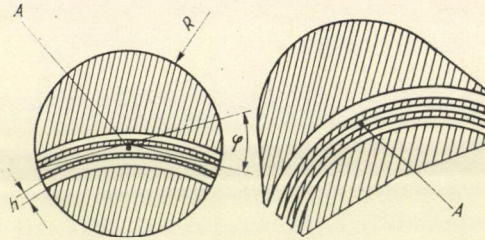
$$\Delta v_0 = 1,844 \cdot \varrho_0 h v_0 / R^2$$

összefüggéssel adhatjuk meg. A szaggató felbontása

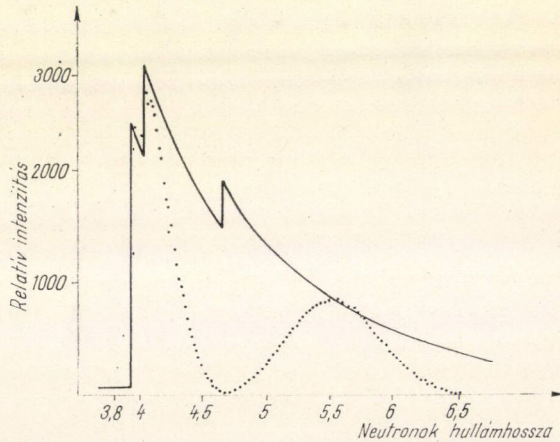
$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 1,844 \frac{\varrho_0 h}{R^2}$$

egyenlettel adható meg. Általában ez 10% körül van. Ha a szaggatóra párhuzamos neutron nyaláb esik az áteresztő képességét az

$$F = e^{\Sigma_{Ae} X} \frac{h}{d+h} \frac{h}{4\pi R} f\left(\frac{v_0}{v}\right)$$



2. ábra. Görbült résű neutron szaggató rotorának keresztmetszete. (Az A pont a forgástengelyt jelzi)



3. ábra. A kihúzott vonal a berillium szűrőn áthaladt neutronok spektruma; pontok a berillium szűrő után elhelyezett görbült résű szaggatóval mért spektrumok két különböző fordulatszámánál

egyenlettel írhatjuk le. Ahol x a résekben helyet foglaló Al kitámasztók hossza. $h(h+d)^{-1}$ az áteresztési felület hasznosítási foka. $h/4\pi R$ a nyitvatartási idő és a zárási idő viszonyából származó gyengítési tényező. \sum_{Ac} az Al makroszkópikus hatáskeresztmetszete v_0 neutron sebességénél.

$$f\left(\frac{v_0}{v}\right) = \begin{cases} 1 - \frac{2}{3} \frac{R^2}{\varrho^2 h^2} \left(1 - \frac{v_0}{v}\right) & \text{ha } 0 \leq \left(1 - \frac{v_0}{v}\right)^2 \leq \frac{\varrho_0 h}{2R^2} \\ \frac{16}{3\sqrt{2}} \frac{R}{\sqrt{\varrho_0 h}} \sqrt{1 - \frac{v_0}{v}} - \frac{4R^2}{\varrho_0 h} \left(1 - \frac{v_0}{v}\right) + \frac{2}{3} \frac{R^2}{\varrho^2 h^2} \left(1 - \frac{v_0}{v}\right)^2 & \\ & \text{ha } \frac{\varrho_0 h}{2R^2} \leq \left(1 - \frac{v_0}{v}\right)^2 \leq \frac{2\varrho_0 h}{R^2} \end{cases}$$

(Az előbb megállapított félérték szélesség az utóbbi formulából származtatható).

Görbültresű szaggató egy körülfordulás alatt csak egyszer enged át. Két egymásután jövő neutron impulzus között $2\pi/\omega$ idő telik el. Ilyen impulzus üzemű szaggatók csak olyan hosszú L repülési hosszban belül használhatók, melyen belül az egymásután jövő neutron impulzusok nem fedik át egymást. Ennek feltétele, hogy a neutron impulzus leglassúbb neutronjait a következő impulzus leggyorsabb neutronjai, azaz a leggyorsabb neutronjai az előbbi impulzus leglassúbb neutronjait ne ériék utól. Tehát a

$$\frac{L}{v_{\max}} = \frac{L\left(\varphi + \frac{2h}{R}\right)}{2R\omega} < \frac{L}{v_{\max}} + \frac{2\pi}{\omega} = \frac{L(\varphi - 2h/R)}{2R\omega} + \frac{2\pi}{\omega}$$

és

$$\frac{L}{v_{\max}} = \frac{L(\varphi - 2h/R)}{2R\omega} > \frac{L(\varphi + 2h/R)}{2R\omega} - \frac{2\pi}{\omega}$$

egyenlőtlenségeknek kell fennállniuk.

Mindkét egyenletből természetesen

$$\frac{Lh}{R^2} < \pi$$

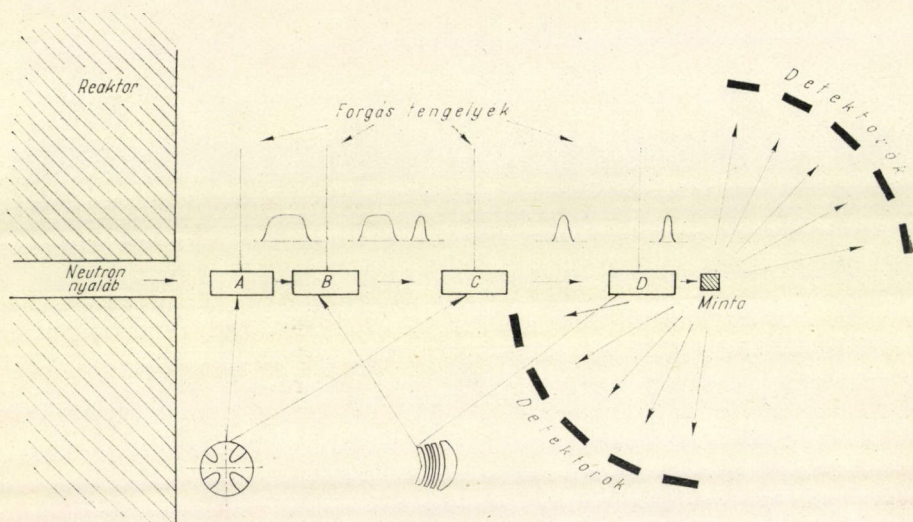
feltétel adódik.

Egy ilyen szaggató átmérője 20–30 cm. Anyaga neutronokat jól abszorbeáló, nagy szakítási szilárdsággal rendelkező anyag. A reaktor csatornából ráeső gyors neutronokat nem szórja ki teljesen, így a „monokromatizált” neutron spektrumunk egy nagy intenzitású gyors neutron háttéren ül. Egészen lassú neutronok (kis intenzitással szerepelnek a beeső spektrumban) a nagy háttérben el is vesznek. Ettől a gyors neutron háttértől kétféleképpen szabadíthatjuk meg a „monokromatikus” spektrumunkat.

- Polikristályos neutron szűrőt helyezünk eléje.
- Megfelelő fázisban forgó újabb szaggatókat helyezünk a „monokromátor” elé.

Keskeny monokromatizált neutronnyaláb előállítása kis háttérrel neutron szaggatókkal. 4. ábra.

Egy egyenes résű gyors neutron szaggatóval (anyaga a gyors neutronokat jól szórja) elérhetjük, hogy a termikus neutron szaggatókra csak akkor essenek neutronok, amikor a rései a forgása során a neutronnyaláb útjába esnek. (Ezzel a gyors neutron háttérrel két nagyságrenddel csökkenthetjük.) A gyors neutron szaggatót, azért célszerű a 4. ábrán (A és C látható) módon kiképezni (görbület), hogy viszony-



4. ábra. Négy szelektorral előállított keskeny neutronnyaláb szórátása az anyagmintán

lag keskeny rés mellett a lassú neutronokat ne vágja. Ez a gyors neutron szaggató minden fordulatban négyszer enged át neutronokat, így a lassú neutron szaggatónál kisebb sebességgel (negyedével) foroghat. A chalk riveri spektrométernél pl. a gyors neutron szaggató rotorjának átmérője 25 cm, a rése 3×3 cm-es. 9000 fordulat/perc esetén 250 μ sec széles impulzust szolgáltat. Anyaga szerves kötőanyaggal kitöltött üveggyapot. A termikus szaggató percenként 36 000 fordulattal forogott 3 db 6 mm-es réssel.

Ez a monokromátor a következőképpen működik. Az első gyors szaggató folytonos nyalábból neutron impulzust csinál. Amíg ez a spektrum a második (lassú neutron) szaggatóhoz ér energiában széthúzódik (repülési idők különbözősége miatt). A második szaggató ezt az impulzust ketté vágja, mert a lassú neutronok közül csak az áteresztési sávjába esőket engedi át. Az impulzusok repülési idejük során jobban szétválnak.

Így érkeznek a harmadik (gyors) szaggatóhoz, ami olyan fázisban forog, hogy a lassú neutronok rést találnak, a gyorsak zárt állapotot. Ezzel máris megkaptuk tisztán a lassú neutron szaggatóval előállított spektrumot.

Egy újabb lassú neutron szaggatóval ezt még keskenyebbé, monokromatikusabbá tehetjük.

3. Polikristály neutronsűrű

A polikristályos neutronsűrű kis abszorpciós hatáskeresztmetszettel rendelkező polikristályos anyag jó abszorbenssel körülvéve. A polikristályos neutronsűrű a Maxwell spektrum neutron nyalábból Bragg reflexióval a $2d_{\max} = \lambda_c$ hullámhossznál kisebb hullámhosszú neutronokat kiszórja, így a polikristályos neutronsűrű után $\lambda \cong \lambda_c$ hullámhosszú neutronokból álló maradék spektrumot kapunk. Pl. 40 cm hosszú Be szűrővel a reaktor spektrumából a 3. ábrán látható spektrumot állíthatunk elő.

Neutronok és a kristály között fellépő neutronsórát rugalmas és rugalmatlan koherens és inkoherens hatáskereszt-metszetek segítségével írhatjuk le. A polikristály neutronsűrűk tárgyalásánál azt kell megvizsgálni, hogy ezek a folyamatok hogyan befolyásolhatják a szűrőn áthaladó neutronspektrumot. Ezt a teljes hatáskeresztmetszet segítségével írhatjuk le.

$$\sigma_t = \sigma_a + \sigma_{\text{coh}}^0 + \sigma_{\text{ink}}^0 + \sigma_{\text{coh}}^{\pm 1} + \sigma_{\text{ink}}^{\pm 1}$$

ahol σ_a az abszorpciós hatáskeresztmetszet, mely ebben a tartományban λ -val arányos, a hőmérséklettől független mennyiség. $\sigma^{\pm 1}$ a rugalmatlan szórás hatáskeresztmetszete. Vizsgáljuk sorra ezeket a mennyiségeket.

a) Rugalmas koherens szórás. σ_{coh}^0 . A koherens rugalmas teljes szórási hatáskeresztmetszetet a szögszerinti differenciális hatáskeresztmetszetből állapíthatjuk meg. Tekintsük a polikristályunk egy mikrokristályát. A mikrokristály $\tau_{h,k,l}$ reciprokácsú, azaz (h,k,l) Miller-indexű síkjától származó szögszerinti differenciális hatáskeresztmetszet [4]

$$\frac{d\sigma_{\text{el,coh}}^{\tau}(k)}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^3 e^{-2W} |F|^2}{V_0} \delta(k_0 - k - 2\pi\tau)$$

egyenlettel adható meg. Ha u_0 az atom négyzetes közepes a reflektáló síkra merőleges elmozdulása, akkor

$$e^{-2W} = e^{-2u_0^2(T) \left(\frac{\sin \theta}{\lambda}\right)^2} = e^{-2u_0^2(T) \left(\frac{\tau}{2}\right)^2}$$

a Debye—Waller tényező. Ismételten kihasználtuk a Bragg egyenletet.

A polikristályos anyag szögszerinti differenciális hatáskeresztmetszetét akkor kapjuk meg, ha ezt a formulát átlagoljuk az összes mikrokristály orientációkra, az összes τ irányra. Ezt a műveletet felülvonással jelöljük. Válasszuk a polár tengelyt τ vektor irányába és jelöljük a polárkoordinátákat $\tau, \vartheta_{\tau}, \varphi_{\tau}$ -val. Ekkor az irányra átlagolt hatáskeresztmetszet

$$\frac{d\sigma_{\text{el,coh}}^{\tau}}{d\Omega} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \frac{d\sigma_{\text{el,coh}}^{\tau}}{d\Omega} d\varphi_{\tau} \sin \vartheta_{\tau} d\vartheta_{\tau}$$

Térjünk át derékszögű koordinátákra, válasszuk a z irányt a polártengellyel megegyezően, ekkor a transzmisszió Jakobi-determinánsa

$$D(\tau_x, \tau_y | \vartheta_\tau, \varphi_\tau) = (2\pi\tau)^2 \sin \vartheta_\tau$$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_{\text{el, coh}}^\tau}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{4\pi} e^{-2w} \frac{|F|^2}{V_0 \tau^2} \int \delta(\tau_x) \delta(\tau_y) \delta(|k_0 - k| - 2\pi\tau_z) d\tau_x d\tau_y d\tau_z = \\ &= \frac{e^{-2w}}{2V_0} \frac{|F|^2}{\tau^2} \delta(2k \sin \vartheta - 2\pi\tau) \end{aligned}$$

mivel $k_0 - k$ vektorok, x és y komponense zérus, és $|k_0| = |k|$ $|k_0 - k| = 2k \sin \vartheta$.

Ezzel megkaptuk egy por mintán rugalmasan szórt neutronok hatáskeresztmetszetének alakját egy Debye—Scherrer gyűrű mentén.

Minden egyes gyűrű csak τ nagyságától függ. Általában több τ vektorhoz tartozik ugyanaz az abszolút érték, ezért egy gyűrű intenzitását úgy kapjuk meg, hogy a fenti hatáskeresztmetszetet megszorozzuk még a multiplicitással, azaz azzal a számmal ahányszor egy (τ) előfordulhat különböző celláknál.

Egy τ reflexióhoz tartozó teljes koherens szórás hatáskeresztmetszetet akkor kapjuk meg, ha integrálunk a szórt neutronok irányára. Mivel

$$d\Omega = 2\pi \sin \vartheta d(2\vartheta) \quad 0 \leq \vartheta \leq \pi/2$$

$$\begin{aligned} \overline{\sigma_{\text{el, coh}}^\tau} &= \frac{1}{2} \frac{e^{-2w}}{V_0} \frac{|F|^2}{\tau^2} \int \delta(2k \sin \vartheta - 2\pi\tau) 2\pi \sin \vartheta d2\vartheta = \\ &= \frac{1}{2} \frac{e^{-2w}}{V_0} \frac{|F|^2}{\tau^2} \int \delta(2k \sin \vartheta - 2\pi\tau) 4\pi \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta = \\ &= \frac{4\pi}{4k^2} \frac{e^{-2w}}{V_0} \frac{|F|^2}{\tau^2} \int \delta(2k \sin \vartheta - 2\pi\tau) 2k \sin \vartheta d(2k \sin \vartheta) = \\ &= \frac{\sigma_b^2}{V_0} \frac{\pi}{k^2} \frac{2\pi\tau}{\tau^2} - \frac{e^{-2w}}{V_0} \frac{2\pi^2}{k^2} \cdot \frac{|F|^2}{\tau} \end{aligned}$$

Ezzel megkaptuk a polikristályos állapotban levő anyag egy magjára vonatkoztatott teljes rugalmas koherens szórás hatáskeresztmetszetét, amely egymástól d távolságban levő (h, k, l) síkok reflexiójától származik.

A polikristály összes előforduló reflexiótól származó teljes rugalmas koherens szórás hatáskeresztmetszetét az összes olyan síkra és olyan reflexiók rendre való összegezéssel kapjuk, melyek a Bragg feltétellel összhangban vannak. Azaz a δ függvény miatt csak olyan argumentumok lehetnek, melyre

$$\frac{2}{\lambda} \equiv |\tau| \quad *$$

(A két hullámvektor között levő szög 2ϑ .) Tehát

$$\overline{\sigma_{\text{el, coh}}} = \frac{2\pi^2}{V_0 k^2} \sum_{|\tau| \cong \frac{2}{\lambda}} \frac{|F|^2 e^{-2w}}{\tau} \frac{\lambda^2}{2V_0} \sum_{\tau \cong \frac{2}{\lambda}} \frac{|F|^2}{\tau} e^{-2w}$$

Tehát az összegezést a reciprok rács minden olyan pontjára kell elvégezni, melyek $2/\lambda$ sugarú gömbön belül vannak. A fenti* egyenletet

$$\frac{2}{\lambda} \cong \frac{1}{d_{hkl}}$$

alakba, azaz $2d_{hkl} \cong \lambda$ alakba írhatjuk.

Ekkor célszerűbb a fenti egyenletet a ráctávolsággal kifejezni!

$$\bar{\sigma}_{\text{el, coh}} = \frac{\lambda^2}{2} \frac{1}{V_0} \sum_{2d_{hkl} \cong \lambda n} F_{hkl}^2 M_{hkl} \frac{d_{hkl}}{n} \exp [-2u_0] \left[\frac{d_{hkl}^2}{4n^2} \right]^{-1}$$

Vizsgáljunk egy konkrét polikristályos anyagot (pl. Be-ot). Írjuk egymás után sorba a $2d_{hkl}$ értékeket a maximális értéktől a kisebbek felé.

A $2d_{\text{max}} = \lambda_c$ -nál nagyobb hullámhosszú neutronokra a koherens rugalmas szórás zérus. $\lambda = \lambda_c$ levágási frekvenciánál hirtelen megemelkedik. Ezután λ^2 szerint csökken, majd a következő d_{hkl} -nél ismét hirtelen megemelkedik, majd λ csökkenésével az előbbihez hasonlóan csökken stb., amíg egész kis hullámhosszaknál oly sok sík lesz aktív, hogy a hatáskeresztmetszet állandó lesz. Az I. táblázatban (22. oldal) néhány polikristály levágási hullámhosszát és a hozzá tartozó energiát foglaltuk össze.

Ha tehát egy reaktor csatorna polienergiás neutron nyalábja útjába elég hosszú nem abszorbeáló polikristály neutronsűrítőt helyezünk, a $\lambda < \lambda_c$ neutronok Bragg-reflexiót szenvednek, megváltoztatják mozgás irányukat, elhagyják a dugót. Ha a dugót abszorbenssel vesszük körül ott befogódnak. $\lambda > \lambda_c$ neutronok csak kis mértékben vesznek el. A 3. és 5. ábrán Be-al szűrt neutron spektrumot mutatok be, melyet a VVR Sz reaktor hidegneutron csatornájánál görbültetésű szaggatóval mérünk.

b) *Inkoherens rugalmas szórás* σ_{ink}^0

A rugalmas inkoherens szórás szög szerinti differenciális hatáskeresztmetszete

$$\frac{d\sigma_{\text{ink}}^0}{d\Omega} = \frac{\sigma_{\text{ink}}}{4\pi} e^{-u_0^2(T)Q_0^2} = \frac{\sigma_{\text{ink}}}{4\pi} e^{-u_0^2(T_0)4k^2 \sin^2 \vartheta}$$

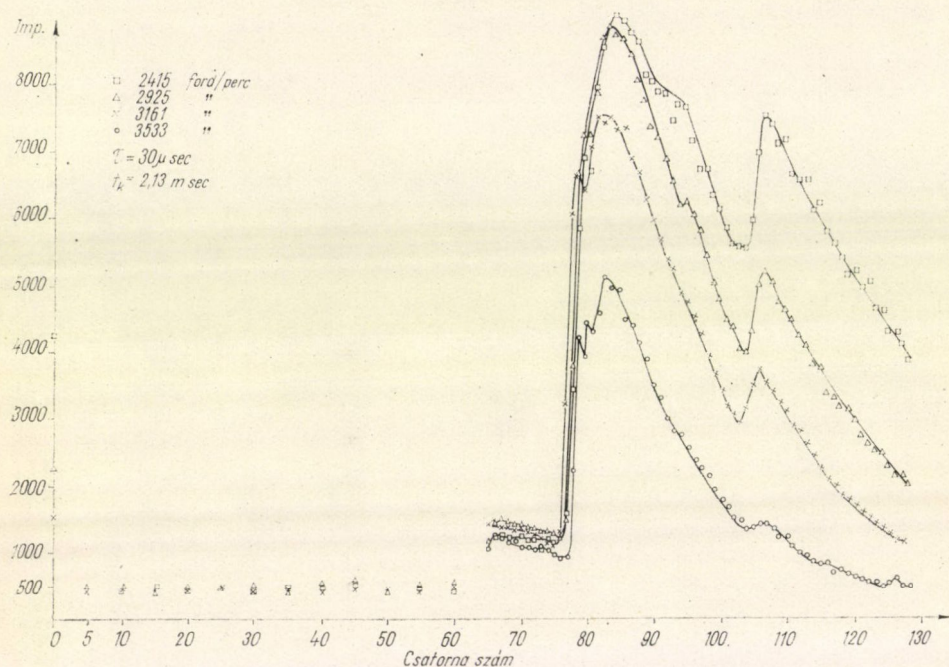
mivel $Q_0^2 = 4k^2 \sin \vartheta$. Így a teljes hatáskeresztmetszet

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{rug}}^{\text{ink}} &= \frac{\sigma_{\text{ink}}}{4\pi} \int_0^{\pi/2} e^{-4u_0^2(T_0)k^2 \sin^2 \vartheta} 2\pi \sin 2\vartheta d2\vartheta = \\ &= \frac{\sigma_{\text{ink}}}{4K^2 u_0^2} \left\{ 1 - e^{-4K^2 u_0^2} \right\} = \frac{\sigma_{\text{ink}}}{16\pi^2 u_0^2} \lambda^2 \left\{ 1 - e^{-\frac{16\pi^2 u_0^2}{\lambda^2}} \right\} \end{aligned}$$

Ha $\frac{16\pi^2 u_0^2}{\lambda^2} \ll 1$, az exponenciális tag sorbafejthető és az első tagnál megállhatunk.

Az eredmény $\sigma_{\text{rug}}^{\text{ink}} = \sigma_{\text{ink}}$

Tehát a rugalmas inkoherens hatáskeresztmetszet sem a kristály hőmérsékletétől, sem a neutronok hullámhosszától nem függ.



5. ábra. Szélessávú görbültresű szaggatóval különböző fordulatszámmal mért neutron spektrum

c) Rugalmatlan szórás σ_{inel} .

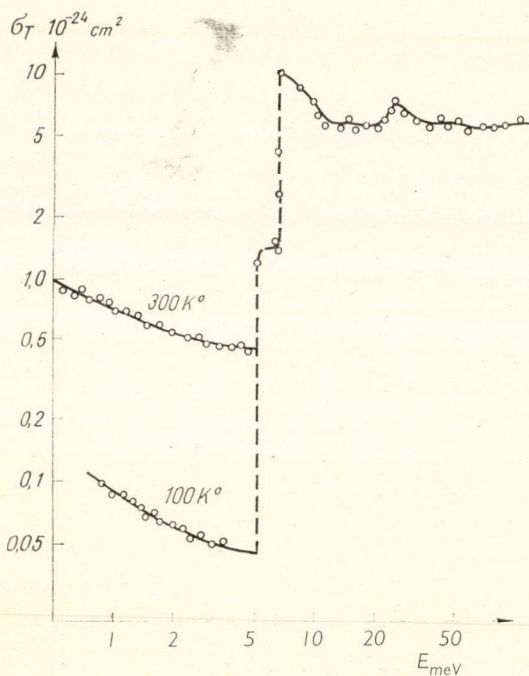
A levágási hullámhossznál nagyobb hullámhosszra a hatáskeresztmetszet

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_a + \sigma_{\text{el, ink}} + \sigma_{\text{inel}}.$$

Az első az abszorpciós hatáskeresztmetszetet jelöli, mely ebben a tartományban $1/v$ ($\sigma_a \sim \lambda$) törvénynek engedelmeskedik és független a hőmérséklettől.

A rugalmatlan hatáskeresztmetszet hullámhossz függése igen komplikált, de ha csak a levágás feletti hullámhosszak tartományában vizsgáljuk alacsony hőmérsékleten $\sigma_{\text{inel}} \approx \sigma^{-1}$ -el adható meg, az a folyamat határozza meg a rugalmatlan hatáskeresztmetszet értékét, amelynél a neutron a rácsrezgésektől egy fonont abszorbeál. Ez a hatáskeresztmetszet is λ -val arányos. $\sigma^{-1} \sim \sigma(T^2)\lambda$, mint σ_a , de attól könnyen megkülönböztethető, mert igen erősen függ a hőmérséklettől.* Tehát, ha

* A Be teljes hatáskeresztmetszetének hőmérséklet függését a 6. ábrán mutatjuk be.



6. ábra. A polikristályos berillium teljes hatáskeresztmetszete

ebben a tartományban mért hatáskeresztmetszetet ($\lambda=0$) értékre extrapoláljuk $\sigma_{el,ink}$ hatáskeresztmetszetet megállapíthatjuk. A hőmérséklet függéséből σ_a határozható meg. Pl. Be-nél $\sigma_a(10 \text{ \AA})=0,056$ barn, $1/v$ függés kihasználásával $\sigma_a(0,025 \text{ eV} = 1,81 \text{ \AA})=10 \pm 3 \text{ mb}$.

Fermi, Sturm és Sachs [5] figyelmeztettek arra, hogy a polikristály mikrokristályainak kisebbnek kell lennie egy bizonyos méretnél, hogy elkerüljük ezeknek az éles éleknek az elmosódását. Weiss [6] vizsgálta részletesen a méretek hatását a csúcsok nagyságára és alakjára. Azt állapította meg, hogy ezeknek $\sim 10^{-3} \text{ cm}$ méretűeknek kell lenni.

I.b. Analizáló rendszerek

A monokromátorral előállított neutronnyaláb az anyagmintára esik, azon különböző szögekbe szóródik, az analizáló rendszer feladata, hogy

a szórt neutronok energiáját megállapítsa. Ennek főbb módszerei:

1. Monokromatizált neutron impulzusnál a repülési idő mérése.
2. Folytonos monokromatikus nyalábnál
 - i, Analizátor egy kristály alkalmazása.
 - ii, A detektor elé helyezett szűrő, azaz berillium detektor használata.

1. Neutron spektrum megállapítása a repülési idő mérésével

Helyezzünk el a neutron szaggatón egy vékony mágnes lapot. Helyezzünk föléje egy magnófejet. Ha a szaggató rotorjába elhelyezett mágnes a magnófej alatt áthalad, ez egy impulzust ad ki, azaz jelzi azt az időpontot, melynél a neutron a szaggató közepén tartózkodott. Azt az időpontot, melyben a neutron a detektorba ér, a detektor impulzusa jelzi. A szaggató és detektor között levő L távolság ismeretében, a t repülési idő mérésével a neutron sebessége

$$v = \frac{L}{t}$$

meghatározható. A különböző sebességű neutronokhoz különböző repülési idők tartoznak.

A neutronok sebesség eloszlását időanalizátorral állapítjuk meg. Időanalizátorral a neutronok repülési idő spektrumát $C(t)dt$ -t azaz t és $t + dt$ időpontok között a dt időtartamban a detektorba csapódott neutronok számát határozzuk meg.

A szórt neutronok energia eloszlását a

$$C(E) = C(t) \frac{dt}{dE} \approx C(t) \frac{-t^3}{L} \approx t^3 C(t)$$

egyenlet alapján állapítjuk meg.

A szórt neutronok időmérési bizonytalansága három tényezőből tevődik össze.

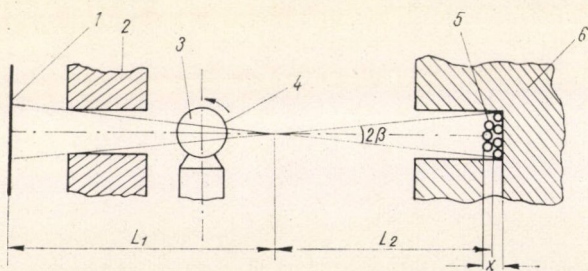
a) A neutronok véges átrepülési ideje a detektoron $\frac{x}{v}$ (5,3 cm detektoron 4 Å hullámhosszú neutronokra és 54 μsec).

b) Az időanalizátor csatornaszélessége Δt_c . E kettőből tevődik össze a szaggató fordulatszáma függvényében (elektronikából származó)

$$\delta t_2 = \sqrt{\left(\frac{x}{v}\right)^2 + \Delta t_c^2}$$

időmérési bizonytalanság.

c) Ehhez járul még a berendezés geometriájától és a fordulatszáma függő δt_1^ω időbizonytalanság, ami azt veszi figyelembe, hogy a szaggató véges ideig engedi át a v sebességű neutront. Ennek kiszámításánál figyelembe kell venni azt is, hogy a neutronok nem ideálisan párhuzamosan érik a szelektort, vagy a detektort, hanem az elrendezés geometriájától függő szögdivergenciával. A 7. ábrán látható sematikus geometriai elrendezésnek megfelelően úgy számolhatunk, hogy a szelektorra eső nyaláb szögdivergenciáját L_1 távolságra levő egyeneses fényességű



7. ábra. 1 reaktor zónaszéle, 2 csatorna vagy kollimátor, 3 szaggató, 4 a szaggató rése, 5 detektorok, 6 védelem

D_1 átmérőjű neutronforrás határozza meg. Hasonlóan meghatározhatjuk a detektor felőli oldal szögdivergenciáját D_2/L_2 . (Állandó a hatásfok). Amelyik a jobb kollimációt adja az határozza meg az időbeli felbontóképességét.

$$\delta t_1^\omega = \frac{D_i}{\omega L_i} \quad \text{ha} \quad \frac{D}{L} \cong \frac{h}{R}$$

Pontosabb analízis szerint, ha $\frac{h}{R} \equiv \frac{D}{L} \equiv \frac{h}{2R}$

$$\delta t_1^{\omega} = (3 - \sqrt{3}) \frac{h}{2R\omega}$$

az együttes időbizonytalanság $\delta t = \sqrt{(\delta t_1^{\omega})^2 + (\delta t_2)^2}$. Olyan detektor átmérőt és csatorna szélességet célszerű használni, melynél

$$\delta t_1^{\omega} = \delta t_2$$

A neutron nyaláb amíg a detektorba ér különböző anyagon (pl. levegőn) halad át, ezért egy része kiszóródik a nyalábból. Ha a neutron áram sűrűség a szaggatónál $I_0(E)$, a detektornál $I_D(E)$, akkor

$$I_D(E) = I_0(E) \prod_i e^{\Sigma_a^i x_i}$$

összefüggés áll fenn. Tehát ahhoz, hogy a helyes szórt neutron spektrumot megkapjuk a mért $I_D(E)$ -t meg kell szoroznunk $\Pi e^{\Sigma_a^i x_i}$ -vel.

Σ_a^i a neutronok útjában levő i -edik x_i vastagságú anyag teljes makroszkopikus hatáskeresztmetszete. [Pl. 4,5 m hosszú levegő a hideg neutronok cca 20%-át kiszórja.] Az anyagmintán szórt neutronokat, [ezért] cca 0,01 atmoszféra nyomásra lecsúszott repülési csőben vezetik a detektorba.

A detektor esetleg nem egyformán érzékeny minden neutron energiára, ezért a mért spektrumot meg kell szorozni a detektor hatásfokával

$$\varepsilon(E) = 1 - e^{-\Sigma_a(E)x}$$

$\Sigma_a(E)$ a detektor impulzust szolgáltató anyagának makroszkopikus abszorpciós hatáskeresztmetszete, x a vastagsága. Az átlagos távolság, melynél a neutron a detektorban (a faltól mérve) abszorbeálódik

$$l(E) = \frac{\int_0^x l \Sigma_a(E) e^{-\Sigma_a l} dl}{\int_0^x \Sigma_a(E) e^{-\Sigma_a l} dl}$$

Így az effektív repülési hossz

$$L(E) = L + l(E)$$

ahol L a szaggató közepétől a detektor aktív térfogatának kezdetéig mért távolság.

2. Analizáló egykristály

Az anyagmintán szórt neutronok energiájának analizálására egykristályt is használhatunk. Az analizálás elve a Bragg-egyenletből származik. Ha $90^\circ - \Theta_A$ szögbe esik a neutron az egykristályra, akkor $90^\circ - \Theta_A$ szögbe szórt neutronok hullámhossza λ . (A neutronok iránya $2\Theta_A$ szöggel változik meg.) Az analizátor

egykristályra ugyan azok mondhatók el mint a monokromátorra. Egykristályt használunk monokromátornak és analizátornak a háromtengelyű kristály spektrométereknél. (Lásd I. d. 2.)

3. Analizálás berillium detektor módszerrel

A detektor elé egy cca 10 cm hosszú Be szűrőt helyezünk el. Ekkor csak azok a neutronok szólaltatják meg a detektort, melyek energiája E kisebb, mint 0,005 eV. Tehát ha a mintára E_0 energiájú neutron esett, a detektor számol, ha a mintában $\hbar\omega \cong E_0 - 0,005$ eV energia nívó van. A berillium levágás alatti neutronok átlagos energiája $\sim 0,003$ eV ezért a nívó energiájára $\hbar\omega \approx E_0 - 0,003$ eV-ot mondunk. A beemenő energia változtatásával tehát a mintában levő energia nívókat megállapíthatjuk.

I.c. Segéd berendezések

Arról, hogy a monokromátorok és az analizátorok fizikai rendeltetésüknek megfelelően működjenek bizonyos segéd alkatrészek gondoskodnak. Ilyenek a

1. egykristály szűrő,
2. mechanikus monokromátor,
3. kollimátorok.

A neutronok jelzésére szolgálnak a

4. detektorok és a monitorok.

Az impulzus üzemű spektrométereknél a detektorok jelzéseit időanalizátorokkal tároljuk.

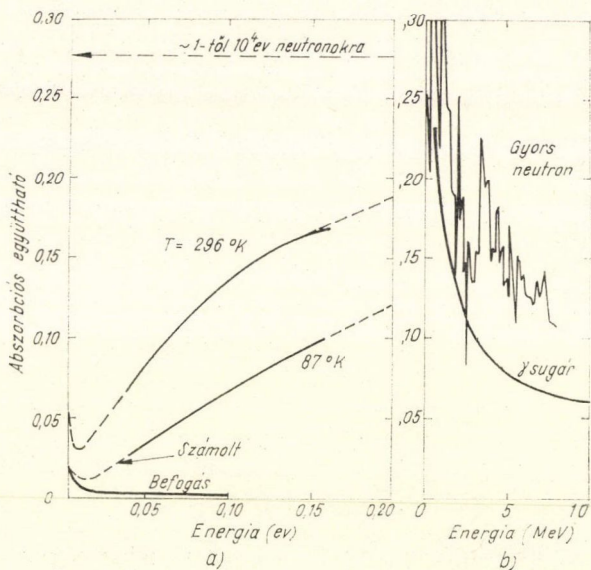
1. Egykristály szűrő

Egykristály teljes hatáskeresztmetszete lassú neutronokra sokkal kisebb lehet, mint az alkotó atomok hatáskeresztmetszetének összege, míg nagyobb energiájú neutronokra eV-tól keV-ig az alkotó atomok hatáskeresztmetszetének összege. Ezért egykristályok szűrőknek használhatók, átengedik a lassú energiájú neutronokat, de kiszűrjék a gyorsabb neutronokat és többnyire a γ sugarakat. Követelmények ezekkel az anyagokkal szemben:

- i. Az alkotó atomok kis abszorpciós és inkoherens szórási hatáskeresztmetszettel rendelkezzenek.
- ii. Ne legyen szerkezeti rendellenesség.
- iii. Nagy egykristályt lehessen készíteni.
- iv. Nagy energiájú neutronokra nagy hatáskeresztmetszettel rendelkezzen.
- v. Lehetőleg nagy rendszámú atomból álljon, hogy γ sugarakra nagy hatáskeresztmetszettel rendelkezzen.
- vi. Debye-hőmérséklete és olvadási pontja magas legyen, hogy a Debye-tényezője kicsiny legyen, és ne kelljen lehűteni alacsony hőmérsékletre. Ilyen anyag a Be. Bi és a kvarc.

10—20 cm kvarc kristályokat lehet a természetben találni, és a gyakorlati céloknak igen megfelelnek. Sőt a transzmissziós hatáskeresztmetszetük független a kristály orientációjától [7]. A 8. ábrából látható, hogy 0,05 eV-nál nagyobb neut-

ronokra egészen jó diszkriminációt biztosít. Pl. amikor egy monokromáló kristály $0,013\text{ eV} - 0,03\text{ eV}$ tartományban dolgozik a $\lambda/2$ második rendű reflexiót erősen lecsökkenti. Pl. $0,02\text{ eV}$ -nál 20 cm kvarc a másodrendűt 11-szeres, az elsőrendűt 2,5-szeresére csökkenti. Ezzel 4,5-szeres nyereségünk lett.



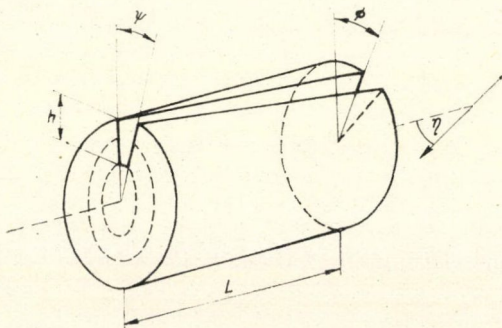
8. ábra. Kvarc egykristály abszorpciós együtthatója lassú-, gyors neutronokra és γ sugarakra

2. Mechanikus monokromátor [8]

A nem kívánatos gyors neutron és gammaháttér csökkentése céljából, egykristályoknál a magasabb reflexiók kiszűrése céljából gyakran használnak mechanikus monokromátorokat. Ez lényegében egy henger palástjára helyezett sollar kollimátor. Folyamatosan engedik át a neutronokat, melyek energiája egy bizonyos keskeny sávba esik.

A kalsruhei spektrométer monokromátorának külső átmérője 42 cm , a rotor hossza 50 cm , 288 rést tartalmaz, melyek $0,3\text{ cm}$ magasak. A résfalak $0,03\text{ cm}$ vastag (gyakran kadmiumozott) rozsdamentes acélból készültek. A fordulatszáma $3600 - 7000$ fordulat percenként változott.

A monokromátor forgórészét a következő paraméterek jellemzik. 9. ábra.



9. ábra. Mechanikus monokromátor sematikus rajza

L a forgórész hossza, R a sugara, h a rések magassága, d a szélességük, Φ a görbült rések elhajlása, η a neutronnyaláb iránya és a monokromátor tengelye által bezárt szög. A tengely irányában haladó neutronok közül csak azok tudnak áthaladni az ω szögsebességgel forgó monokromátoron, melyek sebessége

$$v_0 = \frac{L\omega}{\Phi}$$

A réseket gyakran radiálisan helyezik el. Az átengedett legnagyobb sebességű neutronokat ekkor a

$$v_{\max} = \frac{L\omega}{\Phi - (2d\Phi + \beta)} = \frac{1}{1 - \frac{2d\Phi + \beta}{\Phi}}; \quad \beta = \frac{\Theta L}{R} \quad 2d\Phi \approx d$$

egyenlettel írhatjuk le. A Θ a neutronok szögdivergenciáját jelöli (a kollimátorral együtt). A monokromátor fordulatszámának kisebb kell lenni, mint

$$\omega_{\max} = \omega \left(1 + \frac{2d\Phi + \beta}{\Phi} \right)$$

mert ekkor neutronok nem haladhatnak át a monokromátoron. Egy ilyen spirál résekkel rendelkező monokromátor a görbült résű szaggatókhoz hasonlóan monokromál. Igaz, hogy egyenes résű mechanikus monokromátorral is lehet szűrni a gyors neutronokat, de ehhez a monokromátor tengelyét η szögbe kell állítani a nyaláb irányához. A nyaláb irányát siller kollimátorok jelölik ki. A spirál résű monokromátornál is jelentősen eltolhatjuk az áteresztési függvény helyét, ha a tengelyt kifordítjuk a nyaláb tengelyéből.

Az eltolódás mértékét

$$\lambda_0 = \lambda_0 \left(1 - \frac{\eta}{\Phi} \frac{2L}{2R-h} \right)$$

egyenlet írja le, ahol λ_0 a v_0 -nak megfelelő hullámhossz. Ha a résfalakat csiszolt acéllemezből készítik, az ezeken történő totál reflexió kiszélesíti a monokromátor transzmissziós függvényét; szélesebb energia sávú neutronnyalábot enged át.

3. Kollimátorok

A kollimátorok a neutronnyaláb útját jelölik ki. Kétféle kollimátort szokás használni:

- i. Lyukkollimátort és
- ii. Rés (siller) kollimátort.

A lyukkollimátorokat akkor használjuk, ha csak a térszöget jelöljük ki, és a neutronnyaláb irányában nagy (fokos) divergenciákat is megengedhetünk. Ha a neutronnyalábban csak kis szögdivergenciákat (pl. egykristályok előtt) engedhetünk meg, (tíz perces) rés kollimátort használunk. A lyukkollimátorok néhány centis átmérőjű lyukat, réskollimátorok milliméteres réseket (néhány tizedmilliméteres résfalakat) tartalmaznak. A gamma sugarak kollimálására vasat, ólmot, a neutron sugarakéra B_4C -ot és Cd -ot használunk. A réskollimátorok résfalai többnyire kadmiumozott rozsdamentes acélapokból készülnek.

4. Detektorok és a monitorok

A mintán szórt neutronok detektálására BF_3 számlálócsöveket, szcintillációs számlálókat és He^3 számlálókat használnak. Tekintve, hogy a helybeli adottságok döntik el, hogy hol, melyiket használják és mindegyik típus jól használható, itt csak néhány példát adunk meg.

A Chalk River forgókristályos spektrométernél két db 6,5 cm átmérőjű, 50 cm hosszú, 60 cm-es nyomású 96%-ra dúsított BF_3 számlálóval mértek egy szögben. Amikor Q térben nagyobb felbontást akartak elérni 12 cm hosszú detektorokat használtak. Ezeknek a csöveknek a hatásfoka 4 Å-ös neutronokra 40%. A fázisban forgó spektrométereknél az NRU reaktornál $\text{B}_2^{10}\text{O}_3\text{—ZnS}$ és $\text{Li}^6\text{F—ZnS}$ keverékes szcintillátort használtak 5 inches átmérőjű EMI multiplierrel. A szcintillátorok 0,5 mm vastagok. Ugyanilyen típusú berendezésnél az amerikai MTR reaktornál 2,5 cm átmérőjű, 45 cm hosszú és 120 cm-es nyomású 10 db BF_3 számlálócsővel mértek egy szögben. A He^3 számlálók 2,5 cm átmérőjűek és 20 cm hosszúak a karlsruhei spektrométernél.

Ezeknél a detektoroknál a detektálás alapjául a neutron befogás után keletkező alfarészecskék ionizációját használják fel a beérkező neutronok jelzésére. A többi spektrométernél is ezeket a detektorokat használják, legfeljebb a BF_3 csövek átmérője kisebb, viszont sok esetben azért két sorban egymás mögött helyezik el a detektorokat.

Abból a célból, hogy különböző időben, vagy különböző szögekben, vagy a háttérmeréseket, vagy más paraméterrel (hőmérséklet, mágnesestér stb.) végzett méréseket összenormálják, monitorokat használnak. Ezeket az anyagminta elé helyezik el, hogy a monokromáló rendszer és a reaktor teljesítmény ingadozását kizárják.

Monitornak szinte mindenütt vékony urán hasadási kamrákat használnak.

A detektorokat és a repülési csövet a háttér csökkentése céljából cca 3 cm B_4C -vel és 20—30 cm boros paraffinnal veszik körül.

I.d. Neutron spektrométerek

A működő spektrométereket két csoportba oszthatjuk:

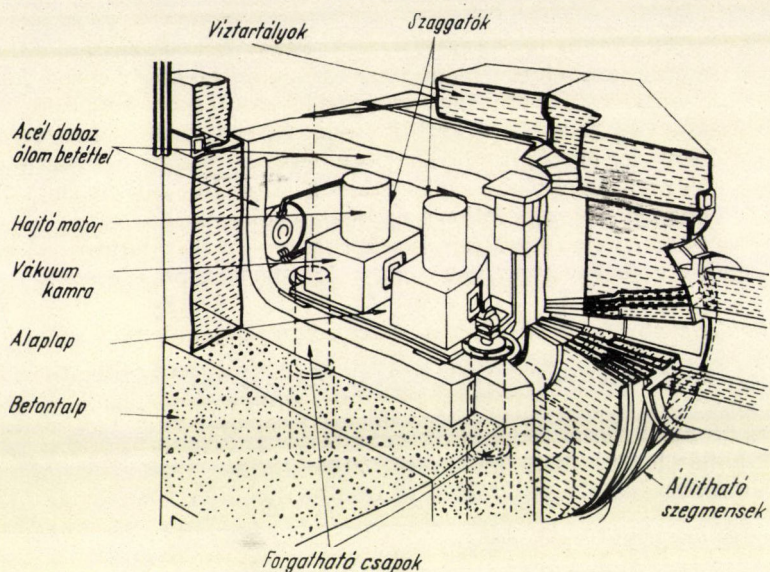
1. Impulzus üzemű spektrométerek.
2. Folyamatos neutronnyalábbal dolgozó spektrométerek.

1. Az impulzus üzemű neutron spektrométerek

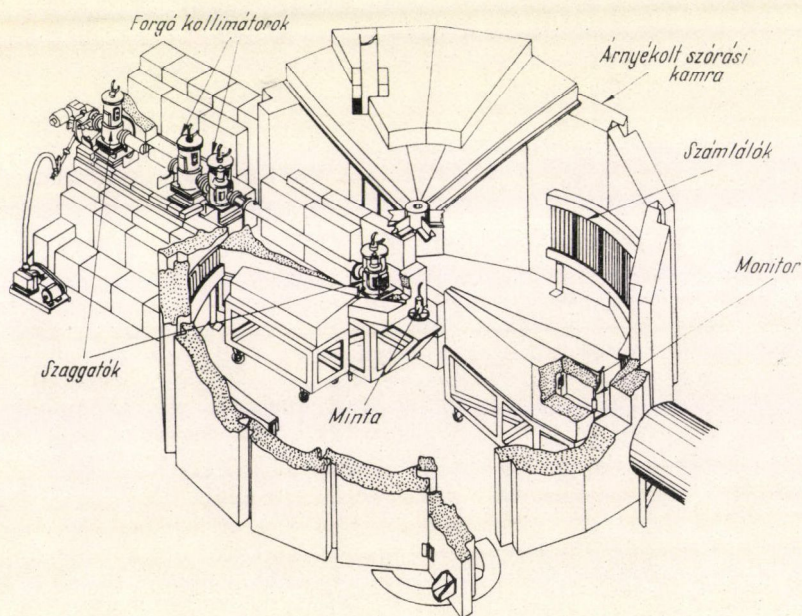
Ezeknek a spektrométereknek a monokromátora a reaktor folytonos nyalábjából neutron impulzusokat állít elő. Ezek esnek az anyagmintára és repülési idő módszerrel mérjük egyszerre több szögben a mintán szórt neutronok energia eloszlását. Ezeknek a spektrométereknek a főbb típusai a következők:

a) Fázisban forgó szaggatókat használó spektrométer

Ilyen típusú a kanadai [3] (Chalk Riverben) NRU reaktornál és az amerikai [9] (Phylips Petroleum Company) MTR reaktornál épített spektrométer. Sematikus rajzuk a 3. ábrán térbeli rajzuk a 10a és 10b ábrán látható. A harwelli spektrométer



10a ábra. A harwelli spektrométer



10b ábra. Az amerikai Phillips Petroleum Company neutron spektrométerének rajza

két neutron szaggatót használ fel. Ilyen spektrométer monokromátorának működési elvét a I. 2. fejezetben írtuk le. Az egymás után jövő szaggatókkal előállított spektrum a 4. ábrán, a szaggatók felett látható. A szaggatók fordulatszámának változtatásával az anyagmintára eső neutronok energiája változtatható. A szórt neutronok energia eloszlását egyszerre 10° — 150° -ig mérik. Ezzel a spektrométerrel tetszőleges $Q - \omega$ tartomány lefedhető, így vele szinte tetszőleges fizikai vizsgálatot végezhetünk, de különösen alkalmas az inkohereus neutron szórás alapjánuló vizsgálatok elvégzésére, energia nivók, frekvencia spektrumok, (reaktorfizikai szempontból fontos), szórástörvények, saját korrelációs függvények stb. megállapítására. Több ágú diszperziós görbék vizsgálatára nem a legoptimálisabb módszer.

b) Polikristályos neutronsűrűítő és neutronszagatót felhasználó spektrométer [10]

Polikristályos neutronsűrűítőnek leggyakrabban Be-t használnak, mert a levágási hullámhossza a legkisebb. Mint a I. 3. pontban megállapítottuk polikristály λ_c -nél kisebb hullámhosszú neutronokat kiszórja a nyalábból, rajta csak λ_c -nél nagyobb hullámhosszú neutronok haladhatnak át. Fontosabb neutronsűrűítők levágási paraméterei az I. táblázatban találhatók.

I. TÁBLÁZAT

Anyag neve:	λ_c (Å)	E_c (eV)
Be	3,95	0,0052
BeO	4,67	0,00375
Pb	5,7	0,0025
C	6,69	0,00183
Bi	6,5	0,00192

Polikristályos Be-sűrűítő és neutron szaggató kombinációjából áll a VVRSz reaktor hidegneutron spektrométere, a Brookhaveni Laboratórium, a stockholmi reaktor spektrométere, a moszkvai Kurcsatov intézet spektrométere (a szög változtatását nem teszi lehetővé) és még sok más spektrométer.

A szaggatóból és a polikristályos sűrűítőből kétféle összeállításban építettek spektrométert.

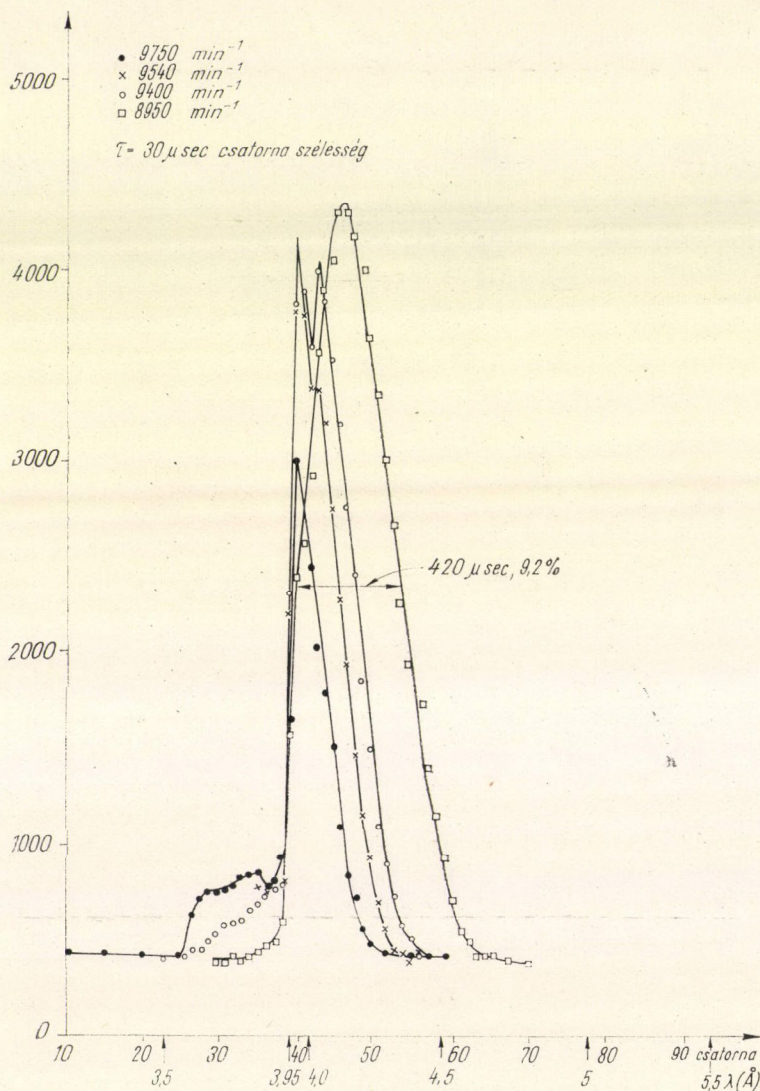
a) A szaggató az anyagminta után

b) A szaggató az anyagminta előtt

helyezkedett el. Az előbbi elrendezés fő hibája egyrészt, hogy az anyagmintán szórt spektrumot a szaggató eltorzíja és erre pontos korrekciót, transzmissziós függvény pontatlan ismerete miatt nehéz végezni, másrészt egyszerre csak egy szögben végezhetjük el a mérést. Ezért újabban az utóbbi típusú elrendezést használják. Ennek működési elve a következő:

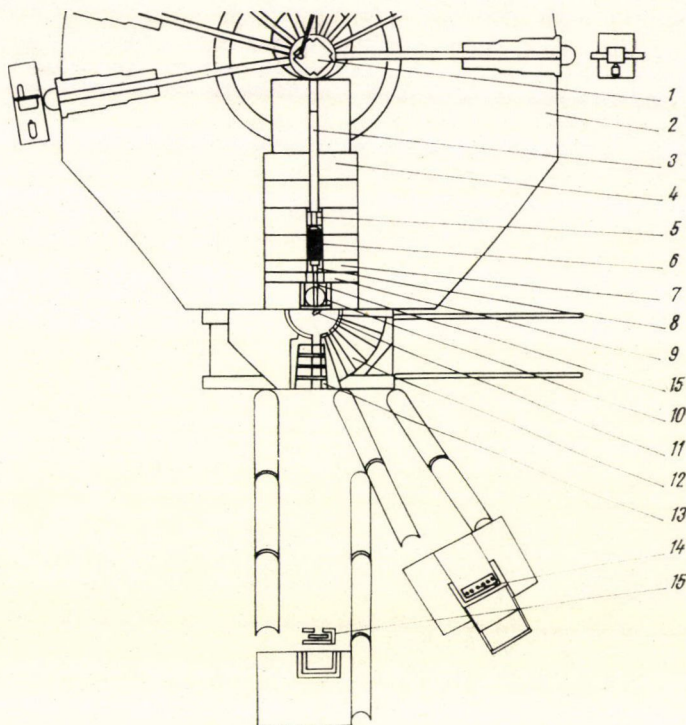
Polikristályos Be sűrűítő a reaktor Maxwell spektrumából csak az E_c -nél kisebb energiájú neutronokat engedí tovább. Ezt egy görbült résű szaggatóval még keskenyebbé tesszük és megszaggatjuk. Így impulzus üzemben egy energiában keskeny nyalábot (11. ábra) engedünk az anyagmintára és repülési idő mérésével mérjük a mintán szórt neutronok energia eloszlását. A VVRSz reaktorunk spektrométerének sematikus rajzát a 12. ábrán láthatjuk. A gamma és a gyors neutron háttér csökkentése céljából a Be elé Bi vagy kvarc kristályt is szokás elhelyezni.

Polikristályos neutronsűrítőt használó spektrométereknél a szűrőn átengedett neutron intenzitás növelése céljából a szűrőt nitrogén hőmérsékletre hűtik le. A I. 3. c. pontban láttuk, hogy σ^{-1} igen erősen (Be esetében négyzetesen) függ a hőmérséklettől. Azaz, a szűrő hűtésével a szűrő fononjain a neutronok rugalmatlan szóródását jelentősen lecsökkenthetjük, amivel igen nagy (Be esetén cca tízszeres) intenzitás nyereségét érhetünk el. (Lásd a 6. ábrát is.) A VVRSz reaktorunk hideg-



11. ábra. 10% sáv szélességű görbült résű szaggatóval és Be szűrővel előállított spektrumok

neutron spektrométerénél a szűrő hűtésével nyert intenzitás nyereséget a 13. ábrán igen jól láthatjuk. [Itt jegyezzük meg, hogy a nálunk kidolgozott hűtőberendezés nitrogén fogyasztása 0,7 liter/óra.]



12. ábra. A KFKI hidegneutron spektrométere

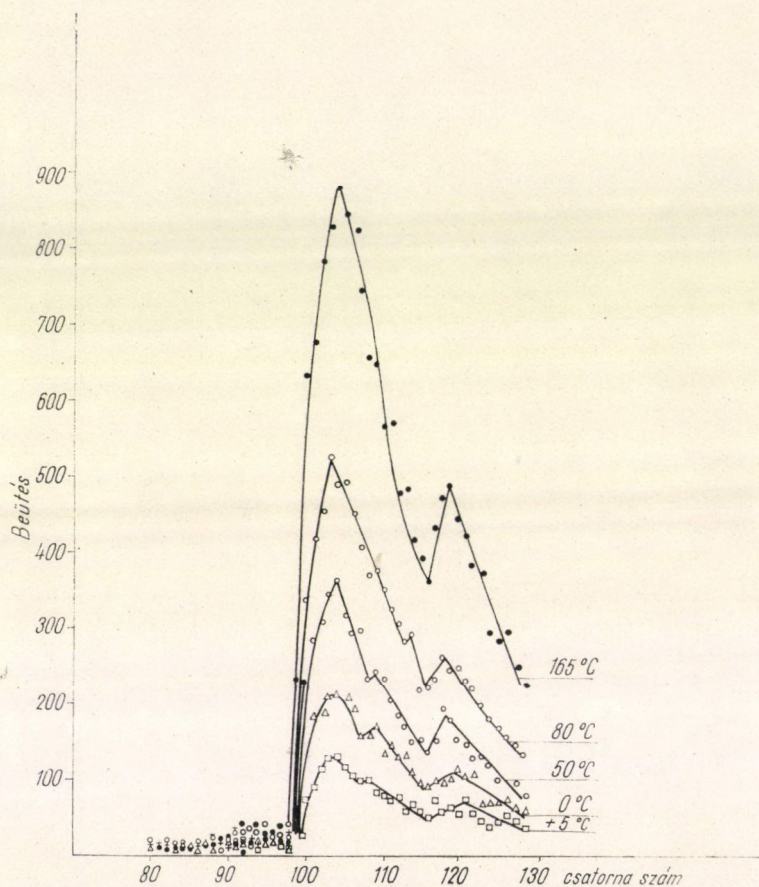
1. a reaktor aktív zónája, 2. reaktortest, 3. vízzár, 4. grafit hengerek,
5. vas kollimátor, 6. nitrogénnel hűtött Be szűrő, 7. vastárcsák, 8. ólom kollimátor, 9. B₄C edénytárcsa, 10. neutron szaggató, 11. anyagminta,
12. vaskollimátorok a szórési szögek változtatására, 13. zár, 14. detektor, 15. monitorok

Ilyen spektrométerrel a mintára eső neutronok energiáját csak korlátozott (E_c -nél kisebb) tartományban változtathatjuk, ezért vele csak kisebb $Q - \omega$ tartomány fedhető le. (Lásd 1. ábrát.) Az a fizikai problémakör, mely ilyen spektrométerrel vizsgálható azonban még igen széles. Pl. translációs módusok, energia nívók, azaz frekvencia spektrumok, egyágú diszperziós görbék, paramágneses neutron-szórás stb. vizsgálata. A kis energia cserék vizsgálatának egyik legjobb módszere.

c) Forgó kristályos repülési idő spektrométer. [11]

Ez a spektrométer egy normális kristály monokromátorhoz hasonlít. Soller-kollimátor helyezkedik el az egykristály előtt és utána. A két kollimátor viszonylagos helyzete olyan, (olyan szögben vannak egymáshoz) hogy az egykristály utáni kolli-

máton a kívánt hullámhosszú neutronok haladjanak át, ha a kristály reflektáló síkja a megfelelő helyzetbe kerül. Az egykristályt egy motor igen nagy sebességgel forgatja. A forgó kristály minden fordulatnál kerül olyan helyzetbe, hogy a beeső neutronnyalábból Bragg-reflexióval a kívánt hullámhosszú monoenergiás neutron impulzusokat (energiáját a Bragg törvény adja meg) szórjon az anyagmintára.



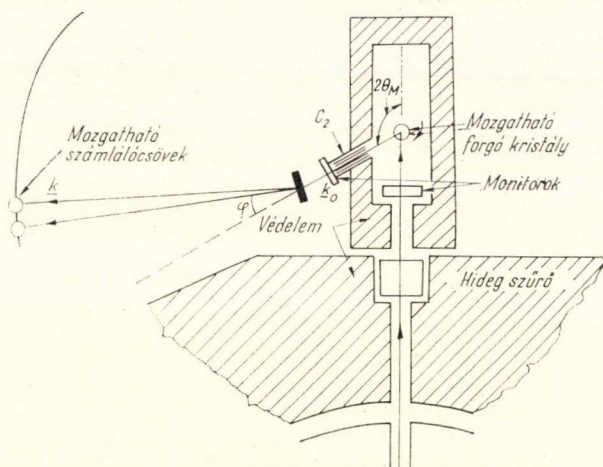
13. ábra. A berillium szűrő hűtésével nyert intenzitás növekedés

A mintán szórt neutronok energiáját a különböző szórési szögekbe elhelyezett detektorokkal, a repülési idő méréseivel állapítjuk meg. Egy ilyen mérési elrendezés sematikus rajzát a 14. ábrán láthatjuk.

Ilyen egykristály pl. egy 3,5 cm átmérőjű, 8 cm magas alumínium henger. A karlsruhei spektrométernél ezt közvetlenül egy 75 wattos 4 pólusú szinkronmotor tengelyéhez erősítették. A motorok fordulata percenként 8000—15 000 között változott.

A forgó kristály nyilvánvalóan rendelkezik a következő előnyökkel a neutron szaggatókhoz képest:

i. A monokromatikus nyaláb kihajlik a csatorna nyaláb irányából, ami háttér szempontjából igen fontos.



14. ábra. Forgókristályos spektrométer vázlata

ii. Különböző reflektálási irányokba más-más energiájú monokromatikus nyaláb állítható elő egyidejűleg. Ez nagyban növeli a csatorna felhasználhatóságának határfokát és az egész spektrométer teljesítő képességét. A kristály cseréjével a mintára eső neutron energiát is széles tartományban változtathatjuk. Tekintsük példaképpen, hogy Al (111) síkjával milyen monoenergiás neutronnyaláb állítható elő különböző szögekben.

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 2,34 \quad \lambda = 4,68 \sin \theta_M$$

Tehát, ha

θ_M	$\lambda(\text{\AA})$
15°	1,22
60°	4,05

A detektor rendszernek és a repülési csőnek ekkor a target változó helye körül forgathatónak kell lennie. Ez függőleges irányban könnyen megvalósítható.

A forgó kristály hátránya, hogy a kristály mozgásából származó Doppler-effektus befolyásolja a kis energia cserés méréseket, továbbá hogy nem csak a kívánt energiájú neutronokat reflektálja, hanem a magasabb rendű reflexiónak megfelelő energiákat is. Ezekről

- i, nagy kvarc vagy Bi egykristállyal
- ii, csiszolt fémfelületen történő totál reflexióval
- iii, mechanikus neutron monokromátorral

iv, fázisban forgó kollimátorral, vagy fázisban forgó másik egykristállyal, v, polikristályos neutron szűrővel szabadulhatunk meg.

Magasabb energiák felé, általában 0,01 felett mechanikus szelektort, forgó kollimátort, 0,01—0,005 eV tartományban csiszolt fémfelületet (hatásfoka nagyban függ a csiszolt fémfelület minőségétől, de egy nagyságrendnyi javulást a két rend intenzitásának viszonyában, 50% intenzitás csökkenés mellett már sikerült elérni) szokás használni. A kvarc egykristály szűrőképeségét a 4. pontban mutattuk meg. 0,005 eV alatt jól beváltak a polikristályos neutron szűrők.

d) Impulzus reaktor mellett működtethető spektrométerek [12]

Az eddig tárgyalt impulzus üzemű spektrométer bármelyike megvalósítható impulzus üzemű reaktornál. Impulzus üzemű reaktor Dubnában működik. Ez a reaktor percenként 800 impulzust ad, szélességük 135 μ sec, 5 cm víz lassító közeg után jönnek ki a csatornából. Ha egy ilyen nyalábba Be szűrőt helyezünk, impulzus üzemből kapjuk a Be szűrő neutronokat. Ez a berendezés Be szűrő és széles felbontású szagatóval működő spektrométerrel egyező típusú. Ennél az elrendezésnél igen széles energia tartomány esik az anyagmintára, így csak inkoherens rugalmatlan effektusok vizsgálatára előnyös igazán. Ha a mintára eső neutronnyalábot energiában keskenyebbé akarjuk tenni, akkor a reaktor impulzusokkal fázisban forgó kis sáv szélességű görbültresű szagatót kell használni.

Impulzus üzemű reaktor mellett elsősorban egykristályokkal működő spektrométer látszik előnyösnek. Egy ilyen csatorna elé helyezett egykristály forgó kristállyal ekvivalens. A felbontóképesége jobb, mint amit szagatókkal állíthatunk elő. A hasznos nyaláb méretét az elkészíthető egykristály mérete határozza meg. Az impulzus üzemű reaktor nagy előnye abban van, hogy a hátteret nem termeli folyamatosan, és igen nagy intenzitású neutron impulzusokat állít elő.

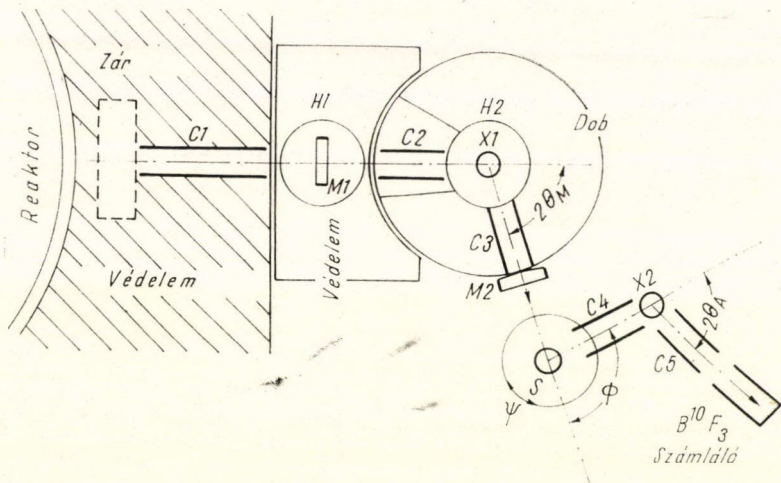
2. Folyamatos neutron nyalábbal üzemelő spektrométerek

Ezek a spektrométerek a mintára eső neutron nyalábot egykristályokkal állítják elő. A mintán szórt neutronok energia eloszlását egykristállyal, vagy a detektor elé helyezett Be szűrő segítségével analizálják. E szerint két fontosabb fajtáját különböztetjük meg.

a) Három tengelyű kristály spektrométer

Három tengely elnevezés onnan származik, hogy a monokromátornak egy tengely körül kell forognia ahhoz, hogy különböző mintára eső neutron energiákat tudjon előállítani, egy másik tengely körül kell forognia az anyagmintának, (ez egykristályok vizsgálatához nélkülözhetetlen) és külön kell forognia az analízáló egykristálynak is, hogy a mintán szórt neutronok energia eloszlását megállapíthassa. A monokromátor egykristálya a különböző hullámhosszú neutronokat különböző $2\theta_M$ szögekbe szórja. Az anyagmintának és az utána következő rendszernek a monokromátor körül egy sínen kell mozognia ahhoz, hogy ezekbe az irányokba beálljon. Az analízáló egykristály a targetet járja körbe, a detektor az analízáló egykristályt. Ez határozza meg a mintán szórt neutronok energia eloszlását. A szö-

gek helyzetét a kollimátorok jelölik ki. Ilyen berendezés sematikus rajzát a 15. ábra mutatja. Ez a spektrométer nem versenyezhetne a repülési idő spektrométerekkel, ha nem nyújtana lehetőséget bizonyos speciális mérési módszerek elvégzésére. Ezek a speciális módszerek elsősorban egykristályok diszperziós görbéinek vizsgálatával kapcsolatosak.



15. ábra. Három tengelyű kristály spektrométer c_1 , c_2 , c_3 , c_4 és c_5 a kollimátorokat, M_1 , M_2 a monitort, H_1 , H_2 a védelem X_1 , X_2 az egykristályokat, S az anyagmintát jelöli.

Az energia és az impulzus megmaradás törvénye a neutronok és a kvázi részecskék kölcsönhatásakor is érvényes, azaz

$$E_0 - E = \pm \hbar \omega_j(q) \quad k_0^2 - k^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega \quad \text{és} \quad Q = k_0 - k = 2\pi\tau - q$$

j itt a polarizációs indexet jelöli, ω_j annak a normálmodusnak a frekvenciája, melyhez a kvázi részecske tartozik. Az energia változásból a normál módus energiája, a szórási szögekből $k_0 - k$ meghatározható. Így

$$\omega \equiv \omega_j(q)$$

diszperziós összefüggés meghatározható.

Ezt a meghatározást bonyolítja az, hogy minden q -hoz több energia csere tartozik. Lásd részletesebben II. 4. a.

Ezért egy több ágú diszperziós összefüggésnél problémát jelenthet annak a megállapítása, hogy mely intenzitás csúcsok tartoznak egy diszperziós görbe ághoz. Ilyenkor célszerű speciális mérési módszereket választani. Erre ez a spektrométer lehetőséget tud nyújtani, mivel négy független paraméterrel

$$Q_M(E_0 K_0), \psi, \varphi \quad \text{és} \quad \Theta_M(E, k)$$

dolgozik.

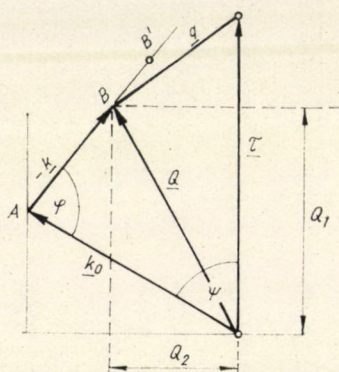
Ha egy fixált E_0 energiánál φ szórási szögnél különböző minta orientációnál mérjük a szórt neutronok energia eloszlását, akkor Q az energia cserének megfelelően változik. A diszperziós görbék mérésével pedig célszerű előre lerögzíteni Q vektort (vagy csak az irányát) vagy a $\hbar\omega$ energia cserét.

Tekintsük egy reciprok rácsterben a k_0 , k , τ vektorokat 16. ábra. A spektrométer síkjában a Q vektor τ -val párhuzamos Q_1 és rá merőleges Q_2 komponensei

$$Q_1 = k_0 \cos \psi + k \cos [180^\circ - (\varphi + \psi)] =$$

$$= k_0 \cos \psi - k \cos (\varphi + \psi)$$

$$Q_2 = k_0 \sin \psi - k \sin (\varphi + \psi)$$

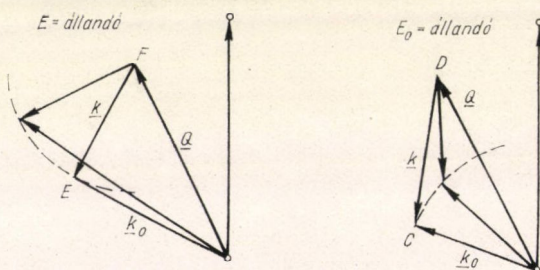


16. ábra

Konstans Q módszer

Ha a szórt neutronok E energiájával változtatjuk φ és ψ szögeket elérhetjük, hogy Q állandó maradjon, azaz állandó Q értéknél mérjük az energia eloszlást. Ezt természetesen csak kristály spektrométerrel érhetjük el.

Adjuk meg Q_1 és Q_2 értékeit, rögzítsük le k_0 (vagy k) értéket. Ezek állandók maradnak. 17. ábra.

17. ábra. Konstans Q módszer

Válasszuk meg az analizátor $2\Theta_A$ (vagy $2\Theta_M$) értékét, számítsuk ki a hozzájuk tartozó φ , ψ értékeket. Ugyanis

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = 2d \sin \Theta_A$$

egyenlet alapján k meghatározható. Ezekkel az értékekkel hajtsuk végre a méréseket. Mérjük a szórt neutronok intenzitását egy választott monitor beütéséig.

Helyezzünk Cd lapot a monokromátor után és mérjük a gyors neutron hátteret (ugyan azon monitor beütésszámmal). Vonjuk ki a két értéket egymásból.

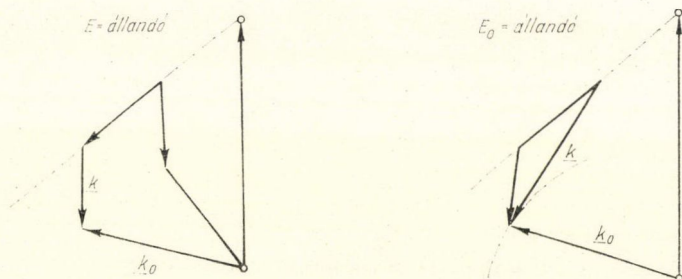
Változtassuk meg Θ_A (vagy Θ_M)-értéket (pl. $1/8^\circ$ -al). Számítsuk ki a hozzátartozó φ és ψ értékeket, állítsuk be, mérjük, s. i. t. Ezt az egész eljárást programozhatjuk pl. 26 lépésre. Egy állandó Q , azaz q mellett az energia eloszlásra 26 pontot kapunk. Így minden q -hoz meghatározhatjuk az energiát azaz a diszperziós görbét. Erre a mérési módszerre a II. 4. a. pontban mutatunk példát.

Konstans q , azaz Q irányba történő mérés

Két változó

k és φ változtatásával k_0 és φ állandónak

k_0 és ψ változtatásával k és φ állandónak



18. ábra. Konstans irányú mérés

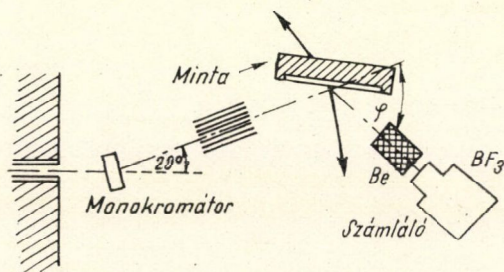
tartásával elérhetjük, hogy q azaz Q egy meghatározott irányban maradjon. Tekintsük a 18. ábrát.

Konstans energia csere módszere

Az előbbiekhöz hasonlóan, most k_0 és k , azaz E_0 és E -t tehát $E_0 - E = \hbar\omega$ energia cserét rögzítsünk le, ekkor φ -t és ψ -t együttesen úgy változik, hogy Q egy meghatározott irányba mozog.

b) Be-detektor módszer

Ennél a módszernél a monokromatikus neutronnyalábót egykristállyal állítjuk elő és a detektor elé helyezett Be-szűrővel analizáljuk a mintán szórt neutronokat,



19. ábra

ahogy a I.b. 3. pontban már leírtuk. A berendezés elrendezése a 19. ábrán látható. Bocsássunk az anyagmintára E_0 energiájú neutronokat és mérjük E_0 függvényében a detektor beütésszámát. Alakítsuk át az E_0 skálát $E_0 - 0,003 \text{ eV}$ egyenlet alapján energia csereére. Így megkaptuk a mintán szórt neutron intenzitást az energia csere függvényében. Ez a módszer a folyadékok

kvázi rugalmas tartományának vizsgálatára nehezebb a többi módszernél, de kiválóan alkalmas a minta karakterisztikus frekvenciáinak meghatározására a hőmérséklet függvényében. Ezt a módszert sikerrel alkalmazták pl. az amonium halidok problémájának vizsgálatára. Mi ennek a módszernek a használhatóságát a II. 1. pontban mutatjuk be.

A módszer előnyei:

1. Az analizáló rendszer hatásfoka állandó, ezért a mért intenzitást nem kell korrigálni az analizáló rendszer érzékenységre, mint a kristályoknál és a detektoroknál különben.

2. A neutron energiát veszít, (fonont, magnont emittál) a nagy frekvenciájú átmenet valószínűsége a Boltzman tényező miatt nem olyan kicsiny. Alacsony hőmérsékleten is lehet méréseket végezni.

3. A monokromátor kristály magasabb rendű reflexiói nem zavarják (a Be kiszórja, analizáló kristálynál ez lényeges).

4. A detektornak csak az alacsony energiájú neutronokra kell érzékenynek lennie. (Csökkenthető a BF_3 gáz nyomása, kevésbé lesz érzékeny gyors neutronokra).

5. A detektor felé nagy térszög használható, az intenzitás nagy lesz.

6. Ha a monitor $1/v$ érzékenységu a mérés közvetlenül az $S(Q, \omega)$ szórásfüggvényt szolgáltatja a k/k_0 tényező kiesik.

II. Néhány fizikai probléma vizsgálata neutronspektrométerrel

Ennek a fejezetnek a célkitűzése kettős. Egyrészt konkrét példákat szolgáltat a különböző mérési módszerekre, másrészt bemutatja a lassú neutron spektrométerek hasznosságát különböző fizikai problémák megoldására. Az utóbbi vonatkozásban ez a fejezet megközelítően sem teljes. Hiszen az itt felvetett problémák mindegyikéről közel hasonló terjedelmű dolgozatot lehet írni.

1. Molekulák kvantumos nívóinak vizsgálata [13]

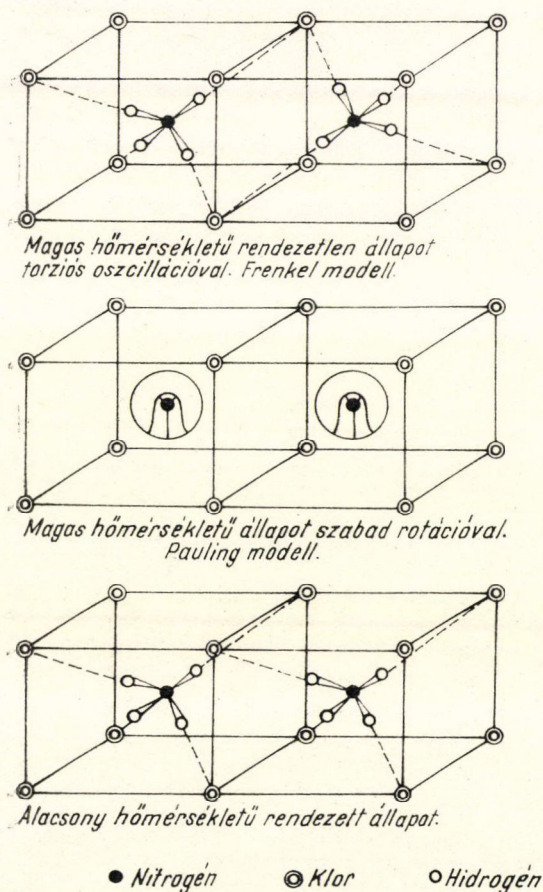
Amónium halidok fajhőjének λ pontját már régen megállapították. De anomáliák vannak a dielektromos állandóban, piezoeffektusban, kiterjedési együtthatóban is. Erre két magyarázat volt:

Pauli szerint alacsony hőmérsékleten az NH_4^+ ion torziós rezgést végez a szomszédos halogén ionok terében. A hőmérséklet növekedésével az oszcillációk amplitúdója nő míg végül szabad rotációt végeznek. Az oszcillációs mozgásból szabad rotációs mozgásba való átmenet okozza a fajhő anomáliát.

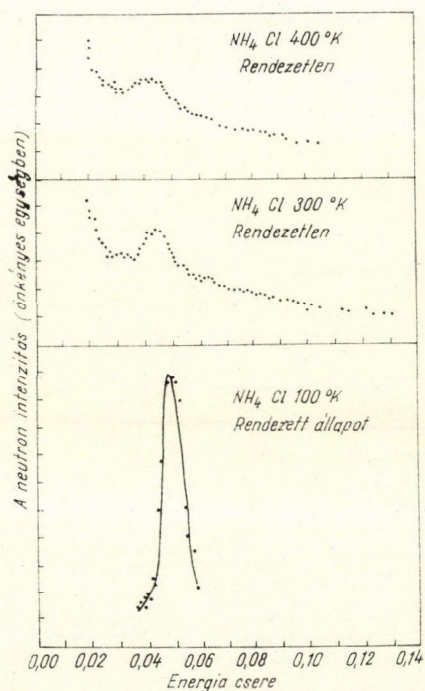
Frenkel szerint az ionok torziós oszcillációt végeznek a λ pont felett is, az anomáliát az okozza, hogy az ionok rendezett állapotból, (azaz minden cellában azonos orientációval állnak), rendezetlen állapotba (azaz orientációjuk a szomszédos cellákban véletlenszerűen alakul ki) megy át. 20. ábra.

Difrakciós kísérletek azt mutatták, hogy a Frenkel-modell helyes, azaz rendezetlen átmenet van, de annak eldöntésére, hogy az ion torziós rezgést végez-e λ pont felett is és alatt is, ismerni kellene a rezgés frekvenciáját és az élettartamát. Erre dinamikai kísérletet kell elvégezni. Ezeket rugalmatlan neutronsórási kísérletekkel meg lehet állapítani.

Amónium halidok kristályai molekula kristályok, így a fonon spektrumok a szokásos optikai és akusztikus ág mellett négy vibrációs csúcsot (négy hidrogén atom) és torziós csúcsot tartalmaz. Neutron spektroszkópiával ezek tanulmányozhatók.



20. ábra



21. ábra

Kísérletek NH₄Cl-re azt mutatták, hogy torziós oszcilláció van a λ pont felett és alatt is. Mert ha szabad rotáció lenne ennek a csúcsnak el kellene tűnnie és kisebb frekvenciáknál kellene egy csúcsnak jelentkeznie. 21. ábra.

2. Az atomok vagy molekulák diffúziós mozgásának vizsgálata

Ez kétféleképpen történhet:

i. Az atomok mozgását az eddigi ismereteink alapján valamilyen modell segítségével próbáljuk leírni, másszóval valamilyen modell segítségével megadjuk a

$G_s(r, t)$ függvényt és az így számolt szórásfüggvényt hasonlítjuk össze a kísérleti eredményekkel.

ii. A korrelációs függvény mérésével.

Itt két fontos határmódellet említhetünk meg. (Részletesen 14.)

Ideális gáz modell

Ha az impulzus és energia csere nagy, a folyadék részecskéinek a neutronokra gyakorolt hatását az ideális gáz modellel írhatjuk le.

Már *Van Hove* [1] megmutatta, hogy

i, minden rendszere (bármilyen típusú atomokból is álljon),

ii, a rendszer állapotától függetlenül (szilárd, cseppfolyós, gáz) elég kis időknél (nagy energia cserénél), ha az impulzus csere is nagy, (nagy szórási szögeknél) a saját korrelációs függvény az ideális gáz modellével

$$G_s(r, t) = [2\pi t(k_B T - i\hbar) M^{-1}]^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{Mr^2}{2t(k_B T - i\hbar)}}$$

adható meg. Ezek után a szórás függvény

$$S(Q, \omega) = \frac{e^{\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} 2\hbar\pi}{\sqrt{4\pi\alpha} k_B T} e^{-\frac{1}{4\alpha}(\alpha^2 + \beta^2)} = e^{-\frac{\hbar\omega}{2k_B T}} e^{-\frac{\hbar^2 Q^2}{8Mk_B T}} S^{kl}(Q, \omega)$$

$$\beta = \frac{\hbar\omega}{k_B T}, \quad \alpha = \frac{\hbar^2 \omega^2}{2Mk_B T}$$

$S^{kl}(Q, \omega)$ a klasszikus ideális gáz szórásfüggvénye. Kis t értékeknél az atomok pályája kölcsönhatás alatt egyenesnek tekinthető, melyen állandó sebességgel mozognak. Az atomokat ekkor az ideális gáz részecskéinek tekinthetjük és a saját korrelációs függvényt a Maxwell-eloszlás adja meg.

$$G_s(r, t) = \pi^{-\frac{3}{2}} v_0^{-3} |t|^{-3} e^{-\frac{r^2}{(v_0 t)^2}}$$

ahol $v_0^2 = 2k_B T/M$ az atomok átlagos sebessége egy dimenziós mozgás során. A szórás függvény pedig

$$S^{kl}(Q, \omega) = \{2\pi^{1/2}/Qv_0\} e^{-\frac{\omega^2}{(Qv_0)^2}}$$

ω -ben Gauss-eloszlás, melynek szélessége

$$\Delta\omega = Qv_0 = \left\{2Q^2 \frac{k_B T}{M}\right\}^{1/2}$$

a hőmérséklet gyökével arányos.

Ezt a szórásfüggvényt, ill. hőmérsékletfüggést mutatja Pelah (7) mérései nagy szórási szögnél folyékony ólomnál.

Diffúziós modell

Ha a vizsgálandó folyadékban az atom oszcillációjának periódus ideje τ elhanyagolhatóan kicsiny, akkor az atom mozgását egyszerű bolyongási problémával modellezhetjük. Az atom sebessége a véletlen ütközések következtében rendszertelenül változik. A kis elmozdulások eloszlásfüggvényét, az elmozdulásuk valószínűségét a klasszikus diffúziós egyenletből származtatjuk

$$D\Delta G_S(r, t) = \frac{\partial G_S(r, t)}{\partial t}$$

D a diffúziós állandó, Δ a Laplace operátor. Ennek megoldása, ha a $t=0$ pillanatban az origóból indulnak ki az atomok (pontforrás)

$$G_S(r, t) = \{4\pi Dt\}^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}}$$

Ekkor az az átlagos négyzetes távolság, melyet az atomok t idő alatt megtesznek

$$\langle r^2(t) \rangle = 6Dt$$

$t \geq 0$ értékekre a szórásfüggvényt a Fourier-transzformációk elvégzésével kapjuk.

$$S(Q, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{DQ^2}{(DQ^2)^2 + \omega^2}$$

Negatív t értékekre G_S szimmetria tulajdonságából következtethetünk.

A szórásfüggvény, Lorentz formájú függvény, melynek félérték szélessége $\Delta\varepsilon = 2\hbar DQ^2$ a szórás szögével változik.

Ez a modell csak igen kis energia és impulzus cserékre szolgáltat szórásfüggvényt.

A diffúziós modell nem veszi tekintetbe, hogy az atom kezdetben oszcillálhat is. Rövid időtartamokra nem írja le helyesen az atomok mozgását.

Ha a molekula diffúziós és oszcillációs mozgást is végez, akkor a saját korrelációs függvényt pl. a

$$G_S(r, t) = e^{-\frac{t}{\tau}} e^{-2W} + \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right) e^{-\frac{r^2}{4Dt}}$$

összefüggéssel írhatjuk le. Itt τ -val jelöltük azt az átlagos időtartamot, mely alatt az atom rezgő mozgást végez. Tényleges idő természetesen nagyobb vagy kisebb lehet

ennél. Annak valószínűsége, hogy t ideig megtartsa rezgő mozgását $e^{-\frac{t}{\tau}}$. Ez alatt az egyensúlyi helyzete körül R sugarú gömbben rezgőmozgást végez. Annak valószínűsége, hogy ebben a gömbben r helyen legyen $\frac{e^{-2W}}{R^3} = R^{-3} e^{-\frac{3}{2} \frac{r^2}{R^2}}$. A $t=0$ idő-

pont környékén persze nem feltétlen rezgő mozgást végez, hanem pl. egyszerű diffúziós mozgást. Ezt írja le a második tag. Ekkor a modell szórásfüggvénye

$$S(Q, \omega) = e^{-2W} \frac{\frac{1}{\tau}}{\left(\frac{1}{\tau}\right)^2 + \omega^2} + \frac{Q^2 D}{(Q^2 D)^2 + \omega^2} - \frac{\frac{1}{\tau} + Q^2 D}{\left(\frac{1}{\tau} + Q^2 D\right)^2 + \omega^2}$$

lesz.

Ha $\tau^{-1} \ll Q^2 D$, akkor

$$S(Q, \omega) = e^{-2W} \frac{\tau}{1 + \omega^2 \tau^2}$$

Ennek félérték szélessége $\Delta E = 2\hbar/\tau$ független Q^2 -től.

Ha $Q^2 D \tau \ll 1$, akkor

$$S(Q, \omega) = \frac{Q^2 D}{(Q^2 D)^2 + \omega^2}$$

míg félérték szélessége $\Delta E = 2\hbar Q^2 D$.

A ΔE félérték szélességek Q függvényében víznél a 22. ábrán láthatók. A görbe vízszintes szakaszából $\tau = 2 \cdot 10^{-12}$ sec adódik.

A korrelációs függvény mérése

A szórásfüggvény méréséből inverz Fourier-transzformációval a tér-idő korrelációs függvényt megállapíthatjuk. Ugyanis

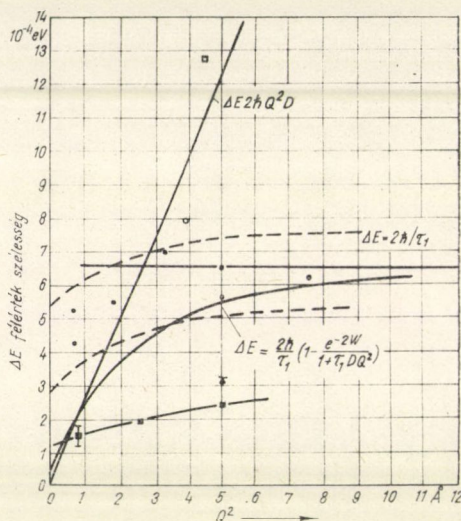
$$G_s(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{-i(Qr - \omega t)} S(Q, \omega) d^3 Q d\omega$$

egyenlettel adható meg. Izotróp rendszereknél

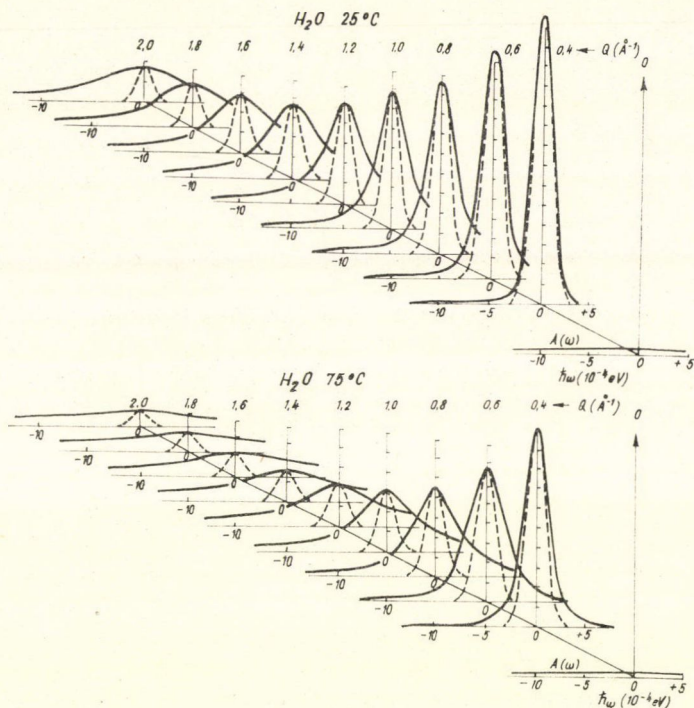
$$G(r, t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty I(Q, t) \frac{\sin Qr}{Qr} Q^2 dQ; \quad I(Q, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} S(Q, \omega) \cos \omega t d\omega$$

A kísérleteknek megfelelő nagy $Q - \omega$ térben kell szolgáltatni a szórásfüggvényt. Bár véges tartományban megállapított $S(Q, \omega)$ függvényből ezt a transzformációt végrehajtani nem lehet, a korrelációs függvény megállapítására mégis van mód. Mivel nagy impulzus és energia csere, azaz nagy Q, ω esetében a saját korrelációs függvényt az ideális gázmodellel, kis Q, ω esetében az egyszerű diffúziós modellel leírhatjuk. Az elég nagy Q, ω tartományban megállapított szórásfüggvényeket ezekkel a modellekkel kiextrapolálhatjuk.

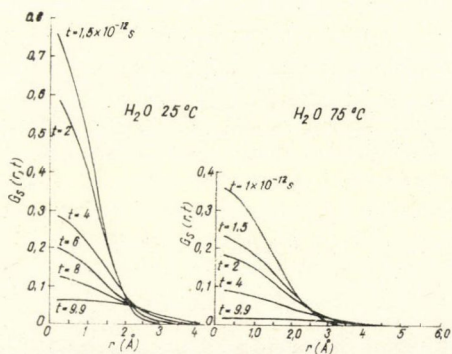
A vízen mért kvázi rugalmas tartomány szórásfüggvényeit a 23. ábrán, a belőlük megállapított különböző időpontoknak megfelelő saját korrelációs függvényeket a 24. ábrán láthatjuk. Ezekből megállapíthatjuk azt a négyzetes közép távolságot, melyet az atom t idő alatt megtesz. (25. ábra.) Láthatjuk, hogy szobahőmérsékleten $3 \cdot 10^{-12}$ sec után az egyszerű diffúziós mozgással leírhatjuk a mozgásait. Magasabb hőmérsékleten már előbb. Ilyen típusú mérésekre az impulzus üzemű spektrométerek igen alkalmasak. A kvázi rugalmas tartomány vizsgálatára csak a hideg neutron spektrométer használható.



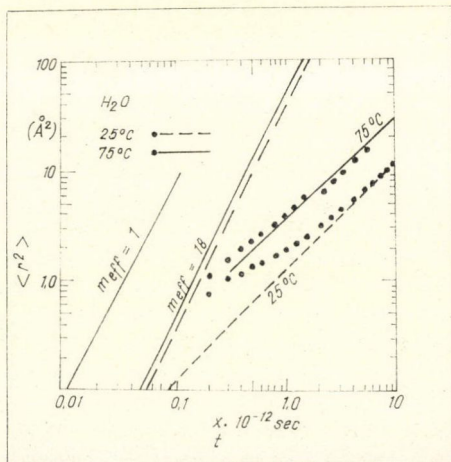
22. ábra. A kvázi-rugalmas tartományok félérték szélességének szögfüggése víz esetében



23. ábra. A víz $S(Q, \omega)$ szórásfüggvénye 25 °C és 75 °C hőmérsékleteken. A szaggatott görbék a felbontás-függvényt jelzik



24. ábra. A víz saját korrelációs függvénye 25 °C és 75 °C hőmérsékleteken



25. ábra. 25 °C és 75 °C hőmérsékletű víz protonjainak négyzetes közepes elmozdulása az idő függvényében. Egyenesek az egyszerű diffúziós modellel számolt elmozdulások 25 °C, ill. 75 °C-nál

3. A frekvencia spektrum mérése szilárd testekben és folyadékokban

A szilárd testek frekvencia spektrumát a fonon sorfejtés egy fonon cserés tagjából állapíthatjuk meg [18]. Ugyanis izotróp rendszernél az inkohereus egyfonon cserés szórásfüggvény

$$S^1(Q, \omega) = Q^2 e^{-2w} \exp(\hbar\omega/k_B T) \frac{f(\omega)}{2\omega \operatorname{sh}(\hbar\omega/2k_B T)}$$

Kérdés $S(Q, \omega)$ méréséből $S^1(Q, \omega) Q^{-2}$ függvényt hogy állapítjuk meg. $S(Q, \omega)$ tartalmazza még a rugalmas és a magasabb fonon cserés tagokat. A mintára eső spektrum ismeretében a rugalmas tag egyszerűen leválasztható. A magasabb fonon cserés tagok Q^4 , Q^6 stb. szorzótényezőt tartalmaznak. Tehát ha képezzük az

$$\left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2 \rightarrow 0} \quad \text{kifejezést, akkor}$$

$$\text{ebből} \quad \left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2 \rightarrow 0} = e^{-\beta\omega} \frac{f(\omega)}{2\omega \operatorname{sh} \beta\omega} \quad \text{azaz}$$

$$f(\omega) = \left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2=0} e^{\beta\omega} 2\omega \operatorname{sh} \beta\omega; \quad \beta = \frac{\hbar}{2k_B T}$$

megállapítható.

Kérdés hogyan állapítjuk meg az

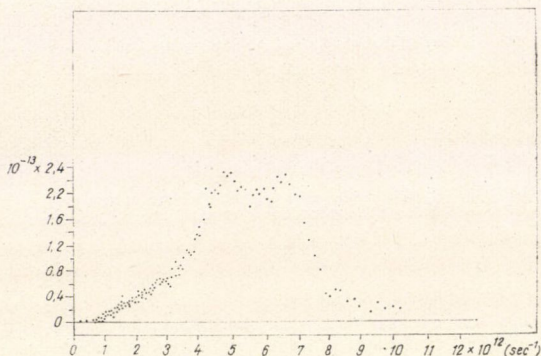
$$\left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2=0} \quad \text{mennyiségeket.}$$

A frekvencia spektrum mérésére az impulzus üzemű spektrométerek igen alkalmasak.

Ezeknél a monokromatizált neutron impulzust bocsátunk az anyagmintára és mérjük a különböző szögekbe szórt neutronok energia spektrumát. Ezekből a spektrumokból összeszedjük egy-egy $\hbar\omega_1, \hbar\omega_2, \dots$ energia cserékhez a különböző szórési szögeknél különböző Q értékekhez tartozó neutron intenzitásokat. Azaz az időanalizátor egyes csatornáiban különböző szórési szögeknél mért neutron intenzitásokat leírjuk. (Minden csatornához egy $\hbar\omega$ tartozik). A szórási szög és az energia csere ismeretében meghatározzuk a hozzátartozó Q_i értékeket. Az intenzitást elosztjuk Q_i^2 -el. Ábrázolják ezeket minden csatornánál ($\hbar\omega$ -nál) és nulára extrapolálják. Így minden ω -hoz kapunk egy

$$\left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2=0} \quad \text{értéket.}$$

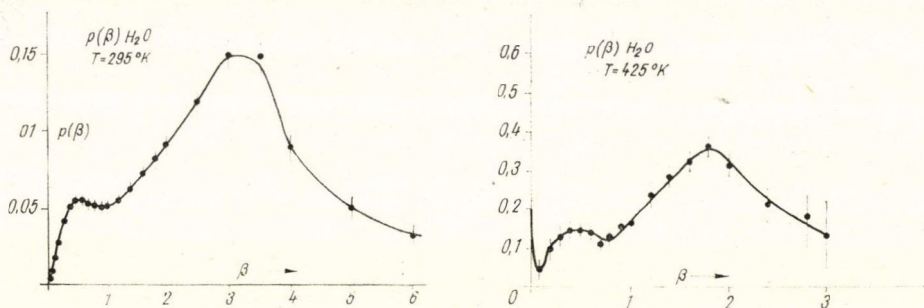
Behelyettesítve a fenti formulába, megkaptuk a kívánt frekvencia spektrumot.



26. ábra. A vanádium fonon frekvencia eloszlása

A vanádium frekvencia spektrumát a 26. ábrán mutatjuk be. [15]. A folyadékok frekvencia spektrumát a sebesség korrelációs függvény ismeretében meghatározhatjuk: [16]

$$f(\omega) = \frac{4M}{3\pi\hbar} \frac{th\beta\omega}{\omega} \int_0^{\infty} \text{Re} \langle v(0) v(t) \rangle_T \cos \omega t dt$$



27. ábra. A víz frekvencia spektruma szoba- és 150 °C hőmérsékleteken

ahol $\langle v(0)v(t) \rangle_T$ a rendszer sebesség korrelációs függvénye. Folyadékoknál a sebesség korrelációs függvény $\omega=0$ pontban nem nulla, hanem $f(0) = \frac{2M}{3\pi K_B T}$

$\int_0^{\infty} \text{Re} \langle v(0)v(t) \rangle_T dt = \frac{2MD}{\pi K_B T}$, azaz a diffúziós állandóval

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} \text{Re} \langle v(0) v(t) \rangle_T dt$$

meghatározott mennyiség.

Könnyen megmutatható, hogy folyadékoknál is [16]

$$\omega^2 \left[\frac{S(Q, \omega)}{Q^2} \right]_{Q^2 \rightarrow 0} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{1}{3} \int \langle v(0) v(t) \rangle_T e^{-i\omega t} dt = \frac{\hbar}{4M} \omega f(\omega) (1 + \coth 2\beta\omega)$$

ami a szilárd testeknél megállapított formulával egyezik meg. Tehát megállapítása ugyan olyan formulával történik. Folyadékoknál a frekvencia spektrum mégis jellegében különbözik a szilárd testek frekvencia spektrumától. A víz frekvencia spektrumát a 27. ábrán mutatjuk be.

4. Egykristályok vizsgálata

Ha egy kristály N atomot tartalmaz, harmonikus közelítésben $3N$ független oszcillátor rendszereként vizsgáljuk. Klasszikusan az oszcillátorok mindegyike egy olyan normál módusnak felel meg, melyben az atomok elmozdulása az egyensúlyi helyzetükből v frekvenciájú q hullámvektorú síkhullámmal írható le. Azonban csak

a reciprokrács egységcelláján levő hullámvektorok adnak különböző hullámokat. Következésképpen ha n atom van a primitív egységcellában, minden q hullámvektorhoz $3n$ módus tartozik. Ezeket v_j frekvenciával és ξ_{jk} polarizációs vektorral jellemezzük. A polarizációs vektor a cella k -adik atomja mozgásának irányát és relatív amplitúdóját adja meg. j index 1-től $3n$ -ig fut.

Alacsony hőmérsékletű mágneses anyagoknál a spinek mozgását spinhullámokkal írjuk le. A magnonokra a fononokéhoz teljesen hasonló kvázienergia és impulzus tétel áll fenn. A diszperziós görbe teljesen hasonlóan állapítható meg, de a diszperziós görbének csak annyi ága van ahány mágneses iont tartalmaz az egységcella.

Egyfonon emissziós vagy abszorpciós koherens szórási hatáskeresztmetszetet (egységnyi térszög és energiacsere) a

$$\frac{d\sigma^1}{d\Omega d\varepsilon} = \frac{2\pi^2 \hbar}{B} \frac{N_j}{N_j + 1} \frac{k}{k_0} |g_i(q, \tau)|^2 \delta(Q + \underline{q} - 2\pi \underline{\tau}) \delta(E_0 - E \pm \hbar\omega)$$

egyenlet írja le, ahol $N_j = \left(\exp \frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1 \right)$ és

$$g_j(q, \tau) = \sum_k \frac{b_k Q \xi_{jk}}{\sqrt{(M_k v)}} e^{-w_k} e^{iQR_k}$$

B az egységcella térfogata, k -adik atom tömege M_k , szórási hossza b_k . Mint látható a neutron csoportok intenzitása Q és ξ_{jk} skalár szorzatától függ.

A neutronok koherens rugalmatlan (egy fonon vagy magnoncserés) szóródásából a következő mennyiségeket határozhatjuk meg:

a) A $v_j(q)$ diszperziós összefüggést. Mivel fononoknál $3n$ módus tartozik minden egyes q -hoz, így a diszperziós görbének $3n$ ága van. Ezek közül hármat (melyek az origóból indulnak ki) akusztikus, a többi optikai ágaknak hívjuk.

b) A normál módusok polarizációs vektorát (a különböző neutron csoportok intenzitás viszonyaiból állapíthatjuk meg).

c) A normál módusok $q(v)$ frekvencia eloszlását. Különösen egyszerű a frekvencia spektrum megállapítása egyszerű köbös polikristályokban, mert ekkor ez egyszerűen a szórt intenzitással arányos.

a) Diszperziós görbék mérése

Ahol a kvázi részecskék kölcsönhatásakor érvényes (kvázi) energia és impulzus megmaradás törvény, azaz

$$E_0 - E = \pm \hbar\omega_j(q); \quad k_0^2 - k^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega_j$$

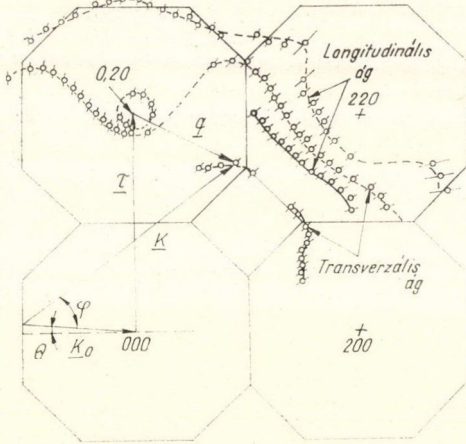
és

$$Q = k_0 - k = 2\pi \underline{\tau} - \underline{q}$$

teljesül, a szórt neutron intenzitásban csúcsok lépnek fel. A csúcsokhoz ω és Q , azaz q rendelhető. Ebből $\omega = \omega_j(q)$ diszperziós összefüggés megállapítható. j itt a polarizációs indexet jelöli, ω_j annak a normálmódusnak a frekvenciája, mely-

hez a kvázi részecske tartozik. Az energia változásból a normálmodus energiája $\hbar\omega_j$, a szórási szögekből $Q = \underline{k}_0 - \underline{k}$ meghatározható. τ -t a kristály reflektáló síkja rögzíti.

A diszperziós görbék mérésére több módszer áll rendelkezésre. A különböző módszereket egy lapcentrált köbös kristály reciprokrácsának (110) síkján mutattuk be 16, 17, 18. ábra.

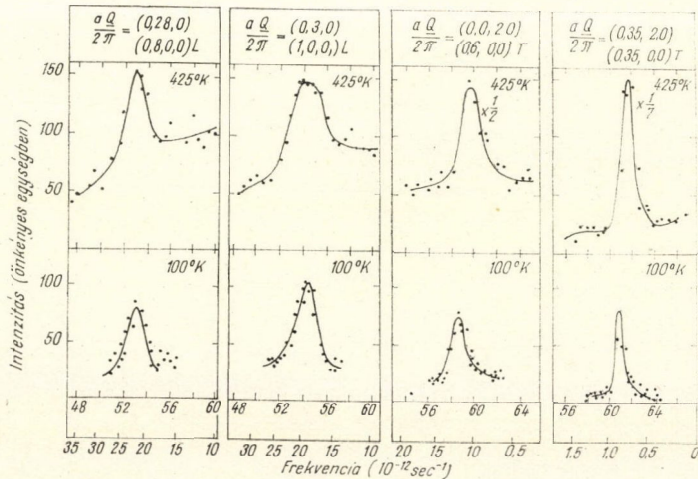


28. ábra. Két 40° és 90° szögnél Al egykristályon mért szórásfelületek

a) A repülési idő spektrométereknél a szuccesszív aproximáció módszerét használjuk egy diszperziós görbe ág meghatározására. Ennél kiválasztjuk k_0 , φ , ψ paramétereket úgy, hogy a szórt neutronok hullámvektora $(-k)$ lehetőleg átmenjen a B ponton. Ha a szórt nyalámban talált neutron intenzitás csúcsához $-k = \overline{AB'}$ hullámvektor tartozik, a mérést új paraméterekkel megismételjük mindaddig, amíg a kívánt pontra nem jutunk. Ez a közelítő eljárás az impulzus üzemi módszerek nagy hátrányát jelentette, de ma már az időanalizátorok csatornaszámának növekedésével, nagyszámú detektorok alkalmazásával eltűnően van, mert a várt intenzitás csúcsok hamar megtalálhatók valamely szórási szögnél.

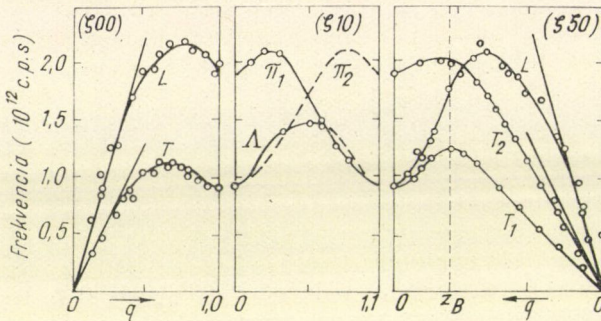
b) Diszperziós görbék mérése impulzus spektrométerrel.

Ennél a spektrométernél rögzítjük k_0 -t, és (és ha kevés detektorunk van a szórási szögét) különböző kristály orientációknál végigmérjük a szórt neutronok energia

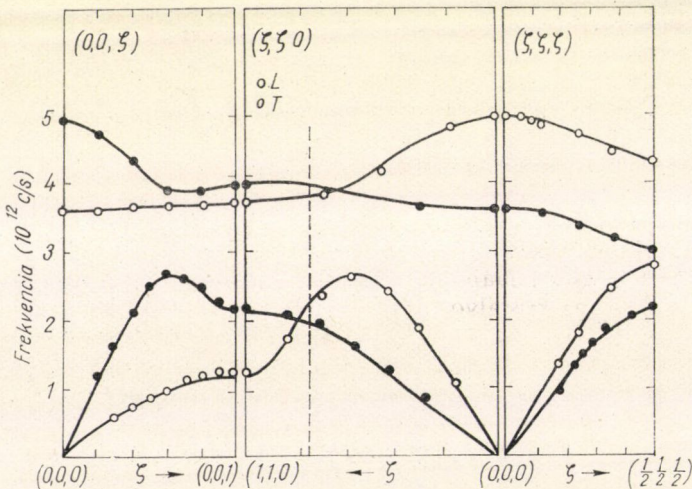


29. ábra. Konstans Q módszerrel ólom egykristályon mért neutron csoportok az analízáló egykristály szöghelyzetének függvényében

eloszlását, ekkor a reciprokrács különböző pontjaiban kapunk intenzitás csúcsokat. Ezeket berajzoljuk a reciprokrácsba. Így az egész reciprokrácsot feltérképezzük. Ezek után a megfelelő ágakhoz tartozókat összeválogatjuk és felrajzoljuk a görbék. Kezdetben csak egy szórési szögnél tudtak egyszerre mérni. Ilyen esetre mutatunk példát a 28. ábrán. Ez az ábra két 40° -os és 90° -os szórési szögek esetén mutatja az Al egykristály (001) síkján (azaz a [001] irány vízszintes volt, a spektrométer forgás tengelyével egyezett meg) mért szórás felületeket. Ilyen szórás felületekből a disperziós görbe felrajzolható.



30. ábra. 100°K hőmérsékletű ólom egykristályon a szimmetria irányokban mért disperziós görbék konstans Q módszerrel és o egyéb módszerekkel



31. ábra. KBr-n 90°K -en különböző irányokban mért disperziós görbék

c) A konstans Q módszerrel, (háromtengelyű kristályspektrométerrel) biztosíthatjuk a disperziós görbék könnyű megállapíthatóságát. A 17. ábrán a CD diagram mutatja azt az állapotot, amikor k_0 rögzített φ és ψ egyidejűleg változik

k -val. Az EF diagram azt a helyzetet, amikor k rögzített φ , ψ és k_0 változik egyidejűleg. Példának tekintsük a lapcentrált köbös ólom egykristályon végzett mérést [17]. A minta átmérője 6 cm. A monokromátor Al (111), 2,26 Å hullámhosszú neutronokat állított elő. Analizátornak Al (200)-át használták. Az így mért neutron csoportokat az analizátor szöghelyzete (szórt energia) függvényében a 29. ábrán láthatjuk. E csúcsok központjai határozzák meg ω és q értékét. Ilyen mérésekből megállapított diszperziós görbét a 30. ábrán láthatjuk. Mint láttuk [18] a neutron csoportok intenzitása $(Q \cdot \xi_j)^2$ -el arányos, így a longitudinális fononokat $(Q, 0, 0)$ irányban észleljük, mivel transzverzális fononokra ekkor $(Q \cdot \xi)^2 = 0$.

Hasonló görbét mutatunk be a 31. ábrán, amit KBr-on [17] végeztek. Ennél a mérésnél kihasználták, hogy a konstans Q módszer lehetővé teszi, hogy a diszperziós görbét bizonyos szimmetria irányban mérjék.

b) Vonalszélességek, közepes élettartamok, anharmonikus effektusok vizsgálata

A neutronok szóródásának elméletét véges élettartalmú fononokon még nem dolgozták ki teljesen. Félklasszikusan úgy értelmezhetjük, hogy a fononokat csilapított hullámokkal reprezentáljuk, azaz $e^{-i\omega_0 t}$ helyett $\exp[-i\omega_0 t - t/\tau]$ hullámokkal írjuk le. Ez arra vezet, hogy a rugalmatlan intenzitás csúcsokat deltafüggvény helyett

$$\frac{1/\tau\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{1}{\tau}\right)^2}$$

Lorentz-formájú függvénnyel írjuk le, melynek szélességéből τ közepes élettartamot meghatározhatjuk. Szokás magfizikai analógia alapján egyszerűen a határozatlansági reláció $\Delta E = \hbar/\tau$ segítségével értelmezni a közepes élettartamot.

Az anharmonikus effektusok vizsgálatai [19] azt mutatják, hogy a hőmérséklet növekedésével a diszkrét fonon csúcsok kiszélesednek és kisebb energiák felé eltolódnak. Kísérletileg ezeket az effektusokat úgy vizsgálhatjuk, hogy különböző hőmérsékletnél mérjük az egyes diszkrét fonon csúcsok helyét és szélességét. Az ólomon végzett ilyen méréseket a 32. ábrán mutatjuk meg. A félértékszélességnek vagy a közepes élettartamnak a hullámvektortól való függését a 33. ábrán láthatjuk. Beal szűrt neutronok Al egykristályon rugalmatlanul szóródott neutron intenzitás csúcsait a hőmérséklet függvényében az olvadás pontig a 34. ábrán láthatjuk. (A szórt neutronokat repülési idő mérésével analizálták). Ezen az ábrán igen jól látható, hogy

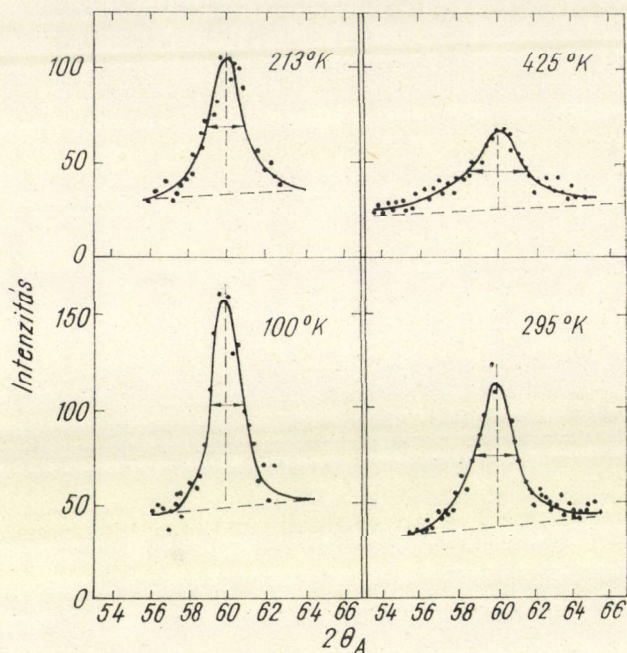
i, az egyfonon vonal kisebb energia cserék felé (nagyobb hullámhosszak felé) tolódik el,

ii, az egyfonon vonalak kiszélesednek,

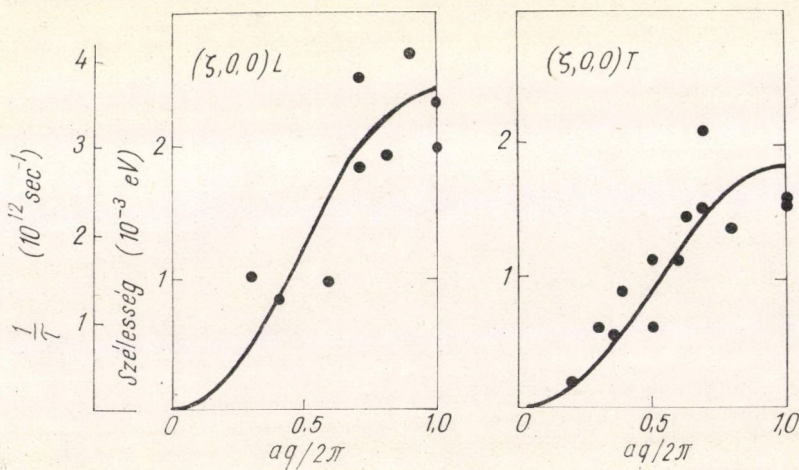
iii, a többfononos intenzitás erősen növekszik. 35. ábrán láthatjuk a különböző hőmérsékleteken mért diszperziós görbéket. A frekvenciának a hőmérséklettől való függését a 36. ábrán láthatjuk. Ezek a mérések azt mutatják, hogy a frekvencia lineárisan változik a hőmérséklettel, azaz

$$\omega(q, T) = \omega(q, T_0) - (9,5 \pm 1) \cdot 10^9 (T - T_0)$$

A közepes élettartam és a közepes szabad úthossz hőmérséklet függését a 37. és

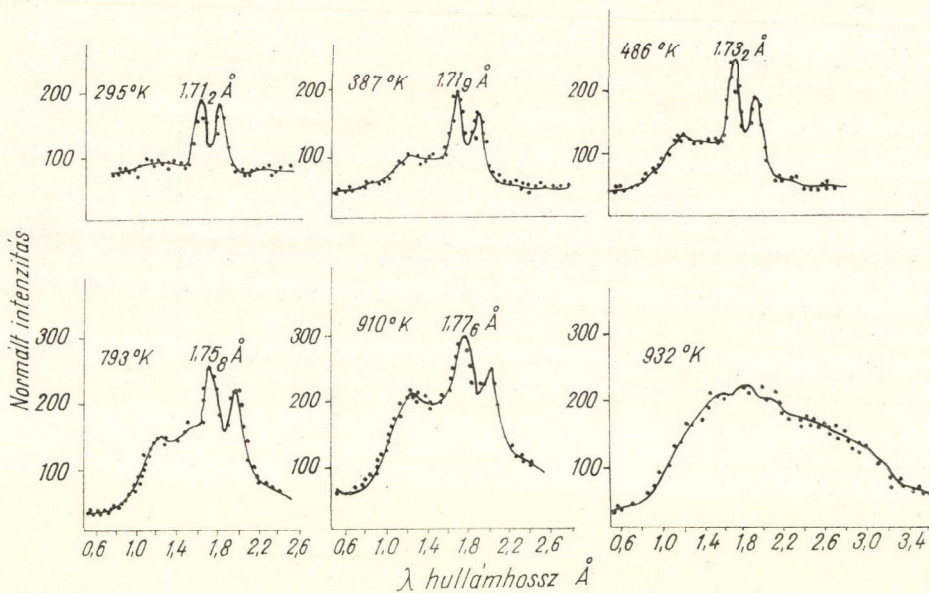


32. ábra. Ólom egykristály [100] T zónahatáránál különböző hőmérsékleten mért neutron intenzitás csúcsai. (A betöltési tényezőre korrigáltuk)

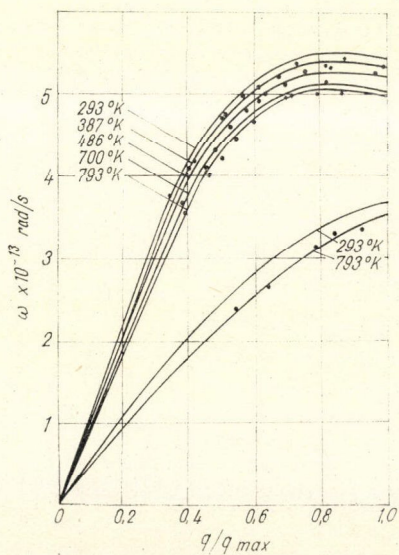


33. ábra. A fonon élettartamok hullámhossz függése ólom egykristályban

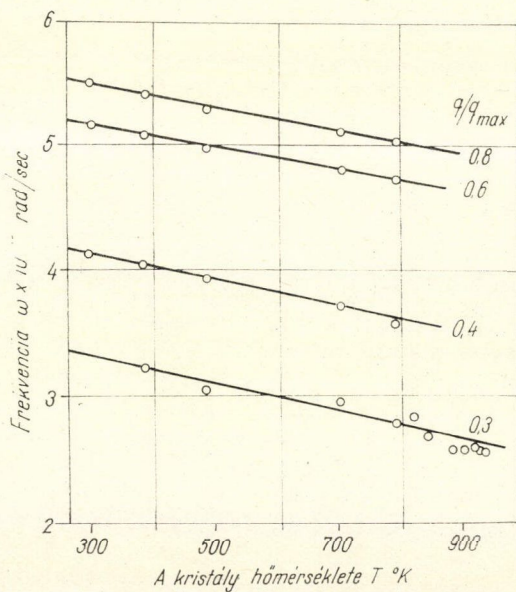
38. ábrán láthatjuk. A közepes szabad úthosszat úgy határoztuk meg, hogy a közepes élettartamot megszoroztuk a hullámsebességgel. Ezek a mérések azt mutatják, hogy



34. ábra. Al egykristály fonon csúcsai a hőmérséklet függvényében



35. ábra. Al egykristályon (310) irányban különböző hőmérsékleteken mért diszperziós görbék



36. ábra. Al egykristály fonon frekvenciáinak hőmérséklet függése

a fonon hullámok 600° felett már igen csillapítottak és a harmonikus közelítés alkalmazása ekkor már kétséges. 600°K -ig a mért spektrum szélessége nem változott. Ezt használhatjuk fel a félérték szélességek megállapítására. Az ekkor mért szélesség $\delta\lambda_f$ ugyanis a rendszer felbontásából származik. Ha a görbék alakja Gauss-típusú a természetes kiszélesedés

$$\delta\lambda_n = \sqrt{\delta\lambda_m^2 - \delta\lambda_f^2}$$

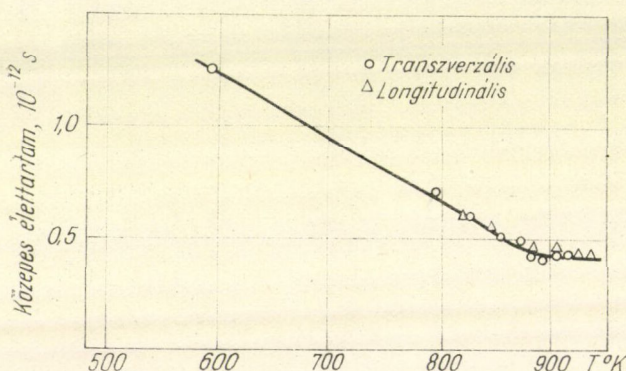
összefüggésből határozható meg. $\delta\lambda_m$ a mért teljes kiszélesedés.

5. Folyékony hélium vizsgálata hideg neutronokkal

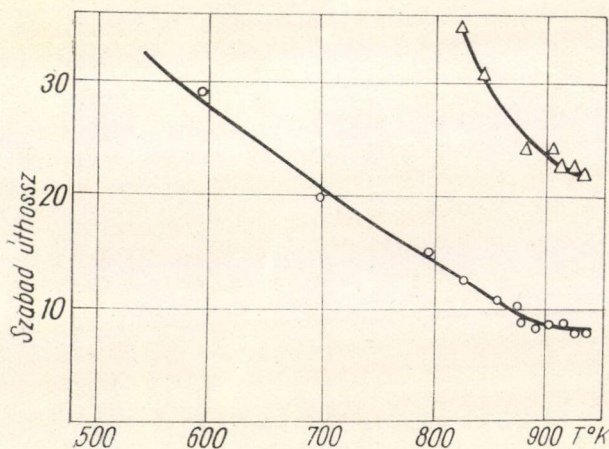
Már több mint 50 éve vizsgálják a folyékony hélium fizikai sajátosságait. 1932-ben [20] megállapították, hogy a fajhőnek $T=2,2^\circ\text{K}$ -nél szingularitása van, mivel

a függvény alakja a λ betűre emlékeztetett λ pontnak nevezték el. A lambda pont alatti hélium (HeII) nagy hővezetőképességgel rendelkezik (1936). 1938-ban [21] nagy viszkozitás csökkenést észleltek. Tisza [22] ezt kettős folyadék modellel értelmezte, azaz a HeII, normál és szuper folyadékból áll.

A szuperfolyadék zéró entropiájú kondenzált Bose–Einstein rendszer. A normálfolyadék az összes termikus gerjesztést tartalmazza. Ez azt eredményezte, hogy a közönséges hanghullámok mellett (a két folyadék fázisban mozog) egy más típusú hullámmozgás is létezik (a két folyadék ellentétes fázisban mozog), de a lokális tömegsűrűség állandó marad. Landau (1941) [23] megalakította a kvantumhidrodinamikai elméletét, amelyben posztulálta, hogy a HeII. kvázikontinuum, amelynek gerjesztései éppúgy kvantáltak, mint a megfelelő szilárdtesté. A longitudinális módusokat a lineáris



37. ábra. Közepes élettartam hőmérséklet függése Al-ban



38. ábra. A szabad úthossz hőmérséklet függése Al egykristályban

energia momentum összefüggésű $E = cp$ fononok, a „transzverzális” modusokat négyzetes diszperziós összefüggésű

$$E = \Delta + p^2/2\mu$$

rotonok jellemzik. Itt c a hangterjedést, μ a roton mozgások effektív tömegét, p az impulzusát jelöli. Az alacsony energiájú roton állapotokat Δ energia gap választja el az alacsony fonon állapotoktól. A két elméletet Feynman [24] fejlesztette tovább, de Landauéhoz hasonló diszperziós összefüggést állapított meg (és közben értelmezte Δ -t).

A He probléma neutronfizikai vizsgálatai 1953-ban kezdődtek el. Hurst és Henshaw [25] megállapították az atomi sűrűség eloszlás (sztatikus pátkorrelációs) függvényét. Ez azt mutatta, hogy az atomok geometriai elrendezésében nincs különbség a λ pont alatt és felett.

Cohen és Feynman [26] azt javasolták, hogy a diszperziós összefüggést neutron spektrométerekkel vizsgálják meg, mert a szórt neutron intenzitásokban határozott csúcsoknak kell fellépni. A vonalak energiájának a szórás szögétől való függése megadja a diszperziós összefüggést. A megjelenő intenzitás csúcsokat a

$$Q \equiv (k_0 - k) = Q_E \quad \text{és} \quad E_0 - E = \hbar\omega$$

impulzus és energia megmaradás írja le. A viszonylag alacsony energiák és hullám-számok miatt ezt csak hideg neutronokkal lehet tanulmányozni (ez technikailag

akkor igen előnyös volt). Három intézetben szinte egyidejűleg megindult a probléma vizsgálata.

Stockholmban Palevszky et. al. [27] Be-szűrővel, és neutron-szaggatóval, Los Alamosban Yarnell et. al. [28] kristályspektrométerrel, Chalk Riverben Henshaw et. al. [29] forgó kristályspektrométerrel végezték a mérést. A különböző helyeken végzett mérések jól egyeztek, amint ez a 39. ábrán is jól látható. Különböző helyeken végzett mérési pontokat másképpen jelöltük.

Ebből a görbéből a Landau-roton egyenletének

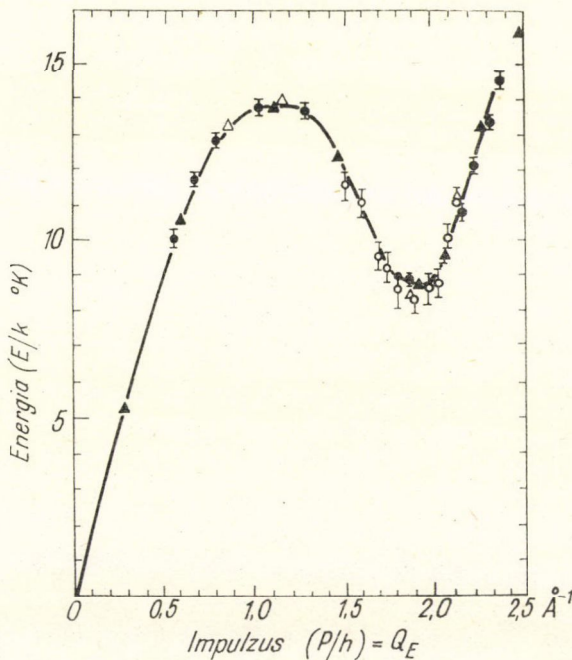
$$E = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2\mu}$$

paramétereire a következőket kapjuk.

$$\frac{\Delta}{K_B} = 8,57 \pm 0,1^\circ\text{K}$$

$$p_0/\hbar = 1,92 \pm 0,01 \text{ \AA}^{-1}$$

$$\mu = (0,16 \pm 0,01) \mu_{He}$$

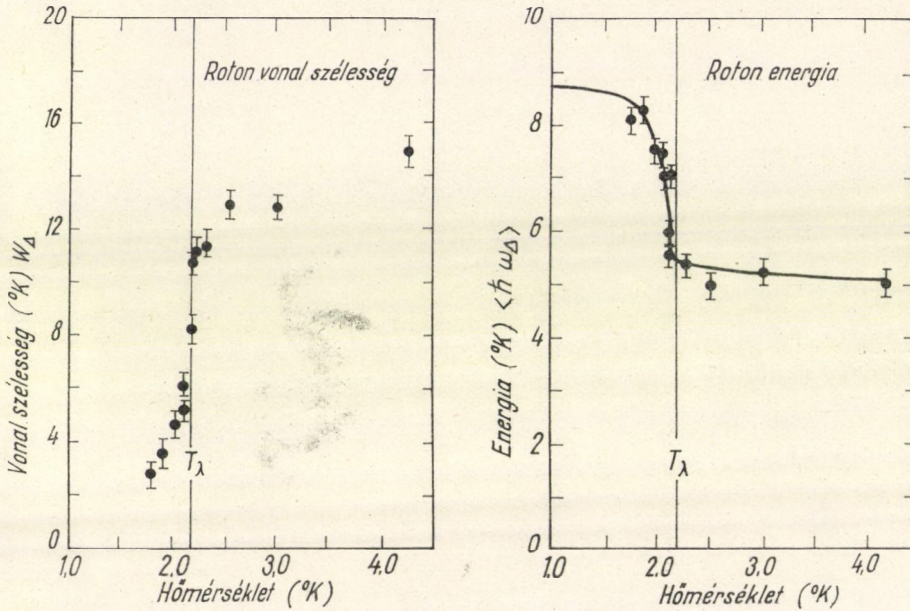


39. ábra. A hélium gerjesztések energiái impulzusok függvényében

A minimum a diszperziós görbében a diffrakciós csúcs helyén lép fel, (mint ahogy a szilárd testnél az első Brillouin-zóna határánál). Piatevski [30] szerint a diszperziós görbének akkor van vége, amikor a kvantum kettéhasadhat, azaz

$$\hbar\omega \cong 2\hbar\omega_A \quad Q_E < 2Q_A, \quad \text{ahol } \hbar\omega_A \text{ és } Q_A$$

a diszperziós görbe minimumánál levő kvantum energiája és hullámvektora.



40. ábra. A Δ minimális energiánál a neutron csúcsok vonalszélessége és átlagos energiája a hőmérséklet függvényében

A mérések azt mutatják, hogy a hőmérséklet növekedésével a csúcsok kiszélesednek. A roton vonalak szélessége a hőmérséklet függvényében a 40. ábrán látható. Igen érdekes az, hogy a λ pont felett is megmaradnak a diszkrét intenzitás csúcsok, ami azt eredményezi, a λ pont felett is van diszperziós görbe. A mérési eredmények kvalitatíve jól egyeznek az elméleti eredményekkel. A mért diszperziós görbéből számolt fajhő jól egyezik a klasszikus fajhő méréssel kapott diszperziós görbével. Pontos intenzitás mérések azonban még sok érdekes felvilágosítással szolgálhatnak.

IRODALOM

- [1] *L. Van Hove*, Phys. Rev. 95, 249, 1954.
M. Nelkin: Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. Vienna. 1960. p. 9.
I. M. Cassel: Progress Nuclear Physics, Vol. 1. p. 185. London Butterworth-Springer 1950.
- [2] *Stone, Slovaiek*, Nucl. Sci. and Eng. 6, 466, 1959.
- [3] *P. A. Egelstaff*, ISNSL. Vienna 1960. p. 309.
- [4] *G. E. Bacon*, Neutron Diffraction. Oxford Clarendon Press.
E. Amaldi: Handbuch Der Physik XXXVIII/2. 1959.
D. I. Hughes: Pile Neutron Research Cambridge Mass. Addison Wesley. 1953.
- [5] *E. Fermi et al.*, Phys. Rev. 71, 589, 1947.
- [6] *R. I. Weiss*, Phys. Rev. 86, 271, 1952.
L. Windsberg et al., Phys. Rev. 75, 975, 1949.
- [7] *B. N. Brockhouse*, I. S. N. S. L. Vienna. 1960. p. 113.
I. Pelah, Phys. Rev. 113, 767, 1959.
I. G. Dash, H. S. Sommers, Rev. Sci. Instr. 24, 91, 1953.
D. Bally et al., Rev. Sci. Instr. 24, 297, 1961.
- [9] *R. M. Brugger, I. E. Evans*: I. S. N. S. L. Vienna. 1960. p. 277.
- [10] *H. Palevsky*, Phys. Rev. 119, 878, 1960.
K. F. Larsson et al.: I. S. N. S. L. Vienna. 1960. p. 587., 329.
- [11] *B. N. Brockhouse*: I. S. N. S. L. Vienna. 1960. p. 113.
- [12] *B. B. Галиков, et al.*: I. S. N. S. L. 1963. p. 119.
- [13] *G. Venkataroman, et al.*: I. S. N. S. L. Vienna. 1963. II. p. 253.
K. Mikke, A. Kroh: I. S. N. S. L. Vienna. 1963. II. p. 237.
- [14] *Bata L.*: KFKI jegyzet. 1963.
- [15] *R. Maas et al.*: I. S. N. S. L. Vienna. 1963. II. p. 145.
P. C. Fine, Phys. Rev. 56, 355, 1939.
- [16] *A. Rahman, K. S. Singwi*, Phys. Rev. 126, 986, 1962.
- [17] *B. N. Brockhouse*: I. S. N. S. L. Vienna. 1963. II. p. 23.
B. N. Brockhouse: I. S. N. S. L. Vienna. 1960. p. 531.
A. D. B. Woods, Phys. Rev. 131, 1025, 1963.
- [18] *G. Placzek, L. Van Hove*, Phys. Rev. 93, 1207, 1954.
R. Weinstock, Phys. Rev. 65, 1, 1944.
L. S. Kothari, K. S. Singwi: Solid. State. Physics. Vol. 8. Academic Press., Inc. New York. 1959.
A. Sjölander, Arkiv. Fysik. 14, 315, 1958.
- [19] *H. Hahn*, I. S. N. S. L. Vienna. 1963. I. 37.
K. E. Larsson, I. S. N. S. L. Vienna. 1960. I. 587.
- [20] *W. H. Keesom*, Proc. Roy. Acad. Amsterdam. 35. 307, 1932.
W. H. Keesom, Physica. 3. 359, 1936.
- [21] *P. Kapitza, I. F. Allen*, Nature Lond. 141. 74, 1938.
F. London, Phys. Rev. 54, 947, 1938.
- [22] *L. Tisza*, Nature Lond, 141, 913, 1938.
- [23] *L. D. Landau*, J. Phys. USSR. 5. 71, (1941., 8, 1, 1949.
- [24] *R. P. Feynman*, Phys. Rev. 91, 1291, 1953.
Phys. Rev. 91, 1301, 1953.
Phys. Rev. 94, 262, 1954.
- [25] *D. G. Hurst, D. G. Henshaw*, Phys. Rev. 100, 994, 1955.
- [26] *M. Cohen, R. P. Feynman*, Phys. Rev. 107, 13, 1957.
- [27] *H. Palevsky, et al.*, Phys. Rev. 108, 1346, 1959.
- [28] *I. L. Yarnell, et al.*, Phys. Rev. 113, 1379, 1959.
- [29] *D. G. Henshaw*, Phys. Rev. Letters, 1. 127, 1958.
- [30] *L. P. Piatevskii*, Sovjet Phys. JETP 9. 830, 1959.

TÉRLEKÉPEZÉSEK TORZULÁSVISZONYAINAK MEGHATÁROZÁSA DIFFERENCIÁLGEOMETRIAI MÓDSZEREKKEL*

SÁROSSY JÓZSEF

BME Elméleti Villamosságtan Tanszék

SZÉKELY VLADIMIR

BME Elektroncsövek és Félvezetők Tanszék

A dolgozat a metrikus terek geometriailag értelmezhető homeomorf leképezéseit tárgyalja a differenciálgeometria módszereivel. A leképezési eljárás értékelésére a szerzők bevezetik a torzulástenzor, a térfogattorzulás és az aránytorzulás fogalmát. A mértéktenzor, valamint a torzulástenzor számítására alkalmas módszerek bemutatása után példák sora illusztrálja a bevezetett fogalmak és számítási módszerek gyakorlati alkalmazhatóságát.

A fizika és a hozzá kapcsolódó tudományágak számos területén (optika, elektronoptika, geodézia, potenciáalterek vizsgálata, stb) találkozunk geometriai leképezésekkel. Bár e szakterületek mindegyikén kialakult a leképezés minőségének értékelésére egy-egy sajátos módszer ([7], [8], [9]), mégis hiányát érezzük a geometriai torzulások egységes leírásmódjának. E hiányosság késztetett minket a cikkben ismertetésre kerülő torzulásjellemzők (aránytorzulás, területtorzulás, stb.) bevezetésére.

Módszerünket elsősorban a TV-kép torzulásainak leírására használtuk, de közeli volt a gondolat, hogy a módszer tetszőleges technikai eszköz által okozott képtorzulásra is kiterjeszthető; mint tapasztaltuk, ez nem is okozott semmi nehézséget. Érdekes viszont, hogy ez az általánosítás nem csak sík felületben fekvő képeknél sikerült, hanem tetszőleges görbefuléletek (pl. gömb—sík) közti leképezésre is. Ezzel a módszer alkalmas lett többek között a geodézia térképvetítés-torzulásainak számítására is. A következő lépés a kettőnél több dimenziós „képekre” való általánosítás volt; itt sem ütköztünk akadályokba.

Kísérletet tettünk ezután torzulásszámítási módszereinknek nem pusztán geometriai problémákra való alkalmazásával is. Megvizsgáltuk pl. az elektrosztatikus terek számításánál használatos konform leképezéssel való kapcsolat kérdését. Az eredmények meglepőek: torzulásszámítási módszerünk alkalmassá tehető potenciáalterek vizsgálatára, leképezésére is. Az ilyen irányú alkalmazhatóság túlhaladja a konform leképezés lehetőségeit, utóbbi csupán a módszer egy speciális esetét jelenti.

Tárgyalásunk beosztása a következő lesz. Az első szakaszban a torzulástenzor fogalmának bevezetése után definiáljuk a torzulásjellemzőket. A második szakaszban a torzulástenzor származtatását általánosítjuk Riemann-terekre, ezt a torzulásjellemzők általánosabb alakjának levezetése követi. A harmadik szakaszban a torzulástenzor számításához nélkülözhetetlen mértéktenzorok meghatározásának gyakorlati módszereit vesszük sorra, míg a negyedik szakaszt az illusztráló példákra szántuk.

* Érkezett 1966. május 6.

1. A torzulástenzor fogalma, arány- és területtorzulás

Ebben a szakaszban egy egyszerű példa általánosítása segítségével bevezetjük a lokális torzulás és a torzulástenzor fogalmát. Hogy tárgyalásunk minél áttekinthetőbb legyen, most csak Descartes-koordinátarendszerre szorítkozunk, és csakis egyetlen pont környezetének torzulását vizsgáljuk. A kapott eredmények birtokában a kérdés teljesen általános megoldását a második szakaszban adjuk.

Általánosan elfogadott a televíziós képvisztaadás vízszintes irányú torzulására vonatkozó következő definíció: egy kiválasztott pontban a torzulást leíró *relatív eltérést* az

$$R_{\%} = \left(\frac{v_p}{v_k} - 1 \right) \cdot 100 \quad (1)$$

képlet adja meg, ahol v_p az elektronsugár talppontjának pillanatnyi sebessége a kiválasztott pontban, v_k pedig a teljes sorhosszra vonatkoztatott átlagos sebesség [1].

Abban az esetben, ha a torzult kép egy képelemének vízszintes méretét állítjuk arányba az eredeti kép megfelelő képelemének vízszintes méretével, csupán a fenti definíciót fejeztük ki más, egy kicsit általánosabb formában. Tüллépve ezen az egydimenziós megfogalmazáson, szeretnénk megtalálni egy képelem tetszőleges irányú méretváltozásának leírasmódját. Bonyolítja a helyzetet az a tény, hogy a torzulás folyamán nemcsak hosszváltozások lépnek fel, hanem az elemi szakaszok iránya, sőt, az általuk bezárt szögek is megváltoznak. Az első pillantásra rendkívül összetett problémát nagymértékben egyszerűsíti, hogy egy pont kellően kis környezetének torzulását egyetlen, véges komponensszámú mennyiséggel, egy *másodrendű tenzorral* le lehet írni. (Ennek az állításnak teljesen általános esetre vonatkozó bizonyítását adjuk a második szakaszban.) Helyettesítsük tehát a vizsgált pont n -dimenziós környezetében felvett elemi szakaszokat a vizsgált pontban értelmezett vektorokkal; ezek után nézzük meg, hogy milyen változtató hatást fejt ki egy másodrendű tenzor e vektorok sokaságára.

Legyen a tetszőleges u_j vektor és megváltozás utáni \tilde{u}_i megfelelője között a kapcsolat

$$\tilde{u}_i = H_{ij} u_j, \quad \det |H_{ij}| \neq 0, \quad (2)$$

ahol az u_j megváltozását előidéző H_{ij} tenzort *ható tenzornak* nevezzük. Mint minden tenzor, H_{ij} is felbontható egy szimmetrikus (S_{kj}) és egy izometrikus (I_{ik}) tenzor egymás utáni alkalmazására [2]:

$$H_{ij} = I_{ik} S_{kj}. \quad (3)$$

Definíciójuk szerint

$$S_{kj} = S_{jk}, \quad (4)$$

és

$$I_{ik} I_{jk} = I_{ki} I_{kj} = \delta_{ij}, \quad (5)$$

ahol $\delta_{ij} = 1$, ha $i = j$ és $\delta_{ij} = 0$, ha $i \neq j$, vagyis δ_{ij} az egységtenzor.

A *ható tenzor* két tényezője szemléletesen is értelmezhető: I_{ik} egy hossz- és szögváltozás nélküli *elfordulást*, S_{kj} pedig hossz- és szögváltozásokat, vagyis *tor-*

zulást okoz. I_{ik} fenti tulajdonságát könnyen igazolhatjuk. A hosszúság- és szög-adatok ugyanis skalárszorzatok segítségével fejezhetők ki:

$$u = \sqrt{u_i u_i}, \quad \cos \varphi_{uv} = \frac{u_i v_i}{uv}; \quad (6)$$

márpedig az izometrikus tenzor egymaga változatlanul hagyja a skalárszorzatokat, mert

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) \equiv \tilde{u}_i \tilde{v}_i = I_{ij} u_j I_{ik} v_k = \delta_{jk} u_j v_k = u_j v_j. \quad (7)$$

(Itt felhasználtuk az (5) összefüggést.)

Mivel vizsgálatunk célja a *torzulásvizonyok* matematikai megfogalmazása, a merevtestszerű elfordulást figyelmen kívül hagyjuk. A torzulásokat pedig éppen hossz- és szögváltozás, azaz a skalárszorzatok módosulása jellemzi. Fordítsuk tehát figyelmünket a skalárszorzat-megváltozásokra!

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) \equiv \tilde{u}_i \tilde{v}_i = H_{ij} H_{ik} u_j v_k = I_{ip} S_{pj} I_{iq} S_{qk} u_j v_k. \quad (8)$$

Az (5) egyenletet ismét felhasználva

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = S_{pj} S_{pk} u_j v_k = \gamma_{jk} u_j v_k, \quad (9)$$

ahol definíciószerűen

$$\gamma_{jk} = S_{pj} S_{pk}. \quad (10)$$

γ_{jk} most már nyugodtan nevezhető *torzulástenzornak*, hiszen csak a torzulásokra jellemző S_{kj} tenzort tartalmazza, az izometrikus tényezőt nem, és a torzult vektorokból képzett skalárszorzatokról közvetlen felvilágosítást ad.

A γ_{ik} torzulástenzor, bár teljes leírást ad a torzulásról, nehezen kezelhető. Komponensrendszere egyrészt nem nyújt azonnali tájékoztatást a torzulás mértékéről, másrészt a használt koordináta-rendszernek is függvénye. Szeretnénk pl. közvetlen választ kapni arra a kérdésre, hogy milyen maximális hosszváltozást szenvedhet egy vektor a torzulás következtében. Pontosabban fogalmazva: a maximális hosszváltozást keressük, továbbá azt az a_i egységvektort, amelyen a ható tenzor ezt létrehozza [3].

(6) és (9) szerint a torzult hosszúságnégyzet:

$$\tilde{u}^2 = \gamma_{ik} u_i u_k. \quad (11)$$

\tilde{u}^2 maximumát az $u_i u_i = 1$ feltétellel keressük. A Lagrange-multiplikátorok módszerét alkalmazva, az

$$\tilde{u}^2(\lambda) = \gamma_{ik} u_i u_k - \lambda (u_i u_i - 1) \quad (12)$$

függvény abszolút szélsőértékét kell megtalálnunk, tehát a keresett a_i vektorunknak a

$$\left. \frac{\partial \tilde{u}^2(\lambda)}{\partial u_j} \right|_{u_j=a_j} = 0, \quad \left. \frac{\partial \tilde{u}^2(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{u_j=a_j} = 0 \quad (13)$$

egyenleteket kell kielégítenie. Elvégezve a deriválást

$$\frac{\partial \tilde{u}^2(\lambda)}{\partial u_j} = \gamma_{jk} u_k + \gamma_{ij} u_i - 2\lambda u_j = 0, \quad u_i u_i = 1. \quad (14)$$

Mivel γ_{jk} szimmetrikus (lásd (10)),

$$\gamma_{jk}u_k - \lambda u_j = 0, \quad u_i u_i = 1, \quad (15)$$

ahol az első egyenlet a tenzor *sajátérték-egyenlete*. Nemtriviális megoldást csak akkor kaphatunk, ha

$$\det |\gamma_{jk} - \lambda \delta_{jk}| = 0, \quad (16)$$

amint az a homogén egyenletrendszer elméletéből ismeretes. A (16) egyenletnek n valós megoldása, *sajátértéke* van, jelöljük ezeket $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ -nel.

A továbbiakban a sajátértékeknek a következő, kellő átjelöléssel mindig elérhető sorrendjét feltételezzük:

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \quad (17)$$

A (15) egyenletekbe a sajátértékeket rendre behelyettesítve megoldásként a *sajátvektorok* sorozatát kapjuk: a_1, a_2, \dots, a_n , ahol

$$a_i a_i = 1. \quad (i\text{-re nem összegezve}) \quad (18)$$

Tekintettel az ismert tételre, mely szerint szimmetrikus tenzorok sajátvektorai ortogonálisak (vagy legalábbis ortogonalizálhatók),

$$a_i a_s = \delta_{is}. \quad (19)$$

Ha egy zárt tartományon értelmezett függvény folytonos, sőt, folytonosan differenciálható, akkor ezen a zárt tartományon maximumát és minimumát is felveszi, mégpedig a differenciálhányados zérushelyeinek valamelyikén. (12) függvényünkre az $u_i u_i = 1$ zárt egységgyömbön ezek a feltételek teljesülnek, tehát maximuma csak λ_1 , minimuma csak λ_n lehet.

Könnyen igazolható, hogy egy szimmetrikus tenzor a sajátvektorai által hordozott koordinátarendszerbe transzformálva a következő alakot veszi fel:

$$\bar{\gamma}_{ij} = \lambda_i \delta_{ij} \quad (i\text{-re nem összegezve}) \quad (20)$$

azaz

$$\bar{\gamma}_{ij} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}. \quad (20a)$$

Ebben az $x_i = a_i \bar{x}_i$ izometrikus transzformáció által meghatározott \bar{x}_i koordinátarendszerben (11) ilyen alakot ölt:

$$\tilde{u}^2 = \lambda_1 \bar{u}_1^2 + \lambda_2 \bar{u}_2^2 + \dots + \lambda_n \bar{u}_n^2, \quad (21)$$

amikor is

$$\bar{u}_1^2 + \bar{u}_2^2 + \dots + \bar{u}_n^2 = 1. \quad (21a)$$

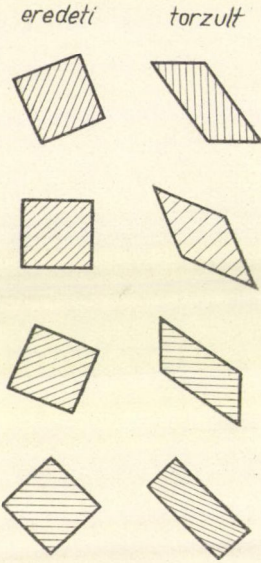
Ez a két egyenlet a sajátértékek pozitív volta miatt (ami (10) alapján belátható) egy ellipszoidot (ún. indukatrixellipszoidot) határoz meg, amelynek tengelyei a koordináta n -lábak — tehát a sajátvektorok — irányába esnek, és hosszúságuk rendre $\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}$.

Próbáljuk a fentiek alapján szemléltetni egy meghatározott pont környezetének megváltozását. A legtöbb eredmények szerint, amíg az u_i vektor a kiválasztott pontot körülvevő egységgömb felületén fut, addig torzult megfelelője (\bar{u}_i) egy ellipszoid felületét pásztázza végig. Vagyis két dimenzióban egy kör ellipszissé, egy négyzet téglalappá, rombuszá, romboiddá torzul (lásd 1. és 2. ábra), míg három dimenzióban a gömb helyett ellipszoidot, a kocka helyébe általános paralelepipedont kapunk. (Természetesen, mint minden eddigi megfontolásunk, a fenti szemléltetés is a pont *kis környezetére* vonatkozik.)

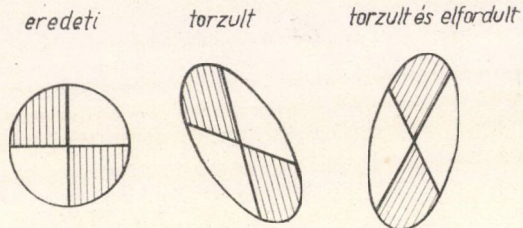
A (2) és (3) egyenletek szerint a képelem megváltozása két lépésben következik be. Először a pont környezete tiszta torzulást szenved, majd ezt egy merevtestszerű elfordulás követi (lásd a 2. ábrát). Látható, hogy a merevtestszerű elfordulás nem változtat lényegesen a torzulás megítélésén, tehát valóban figyelmen kívül hagyható. (Erre a kérdésre e szakasz végén még egyszer visszatérünk; ott még egy mélyebb okát is adjuk eljárásunknak.)

Érdemes megfigyelni, hogy a képelem torzulásáról nyerhető információk két csoportba sorolhatók. Az első csoportba az *abszolút* jellemzők tartoznak (pl. az ellipszis kis- ill. nagytengelye, excentricitása, területe, stb.); ezek a torzulástenzor invariánsai. A második csoportot a *relatív* jellemzők alkotják (pl. a maximális ill. minimális torzulás iránya, stb.), melyek a torzulástenzor sajátvektoraival kapcsolatosak, és ebből is láthatóan koordináta-rendszer- (nézőpont-) függők. Bár a torzulás maradéktalan leírásához mindkét csoportbeli adatok szükségesek, mégis — nézőpontfüggetlen voltuk miatt — az abszolút jellemzők többet mondanak.

Fordítsuk tehát figyelmünket az abszolút jellemzőkre, a torzulástenzor invariánsaira. Ilyen jellemzők pl. a sajátértékek is. Nem nehéz megmutatni, hogy utóbbiak összessége független és egyben teljes rendszert alkot. (Elegendő a torzulástenzor főtengely-transzformáció utáni alakjára gondolnunk.) Ebből következik, hogy bármely invariáns a sajátértékekből egyértelműen meghatározható.



1. ábra



2. ábra

A sajátértékek szemléletes tartalommal is rendelkeznek, mert (21)- és (21a)-ból következően éppen a torzulási ellipszoid tengelyeinek négyzetét adják, a tengelyhosszak ismeretében pedig már képet alkothatunk a torzulás jellegéről, mértékéről. Képezhetünk azonban még célszerűbb invariánsokat is. Igen hasznos a *térfogattorzulás* (T_n) bevezetése; ez az invariáns a torzulási ellipszoid és az egység-gömb térfogatának aránya. Kapcsolata a sajátértékekkel nyilvánvaló:

$$T_n^2 = \prod_{k=1}^n \lambda_k. \quad (22)$$

Hasonlóképpen definiálhatjuk egy tetszőleges l -dimenziós altér térfogatelemének torzulását is. (Ez természetesen függ az altér állásától is.) Invariánsként ennek maximumát ill. minimumát jelölhetjük meg. Ismét egyszerű az összefüggés a sajátértékekkel:

$$T_{l \max}^2 = \prod_{k=n-l+1}^n \lambda_k, \quad (23)$$

$$T_{l \min}^2 = \prod_{k=1}^l \lambda_k. \quad (23a)$$

Nyilván

$$T_{n \max}^2 = T_{n \min}^2 = T_n^2. \quad (23b)$$

Egy másik, hasonlóan célszerű és szemléletes invariánssorozat az *aránytorzulások* (A_l) rendszere. Az l -dimenziós aránytorzulás egy l -dimenziós térfogatelem maximális és minimális térfogattorzulásának hányadosa:

$$A_l^2 = \frac{\prod_{k=n-l+1}^n \lambda_k}{\prod_{k=1}^l \lambda_k}, \quad (l < n). \quad (24)$$

(24)-ből nyilvánvaló, hogy

$$A_l = A_{n-l}. \quad (24a)$$

Vizsgáljuk meg, hogy a fenti leszámaztatott invariánsok közül hogyan választhatunk ki független és egyben teljes rendszert. Először is mind $\{T_{l \max}\}$, ($1 \leq l \leq n$), mind $\{T_{l \min}\}$, ($1 \leq l \leq n$) független és teljes rendszert alkot. (A bizonyítást egyszerűsége miatt elhagyjuk.) Ennek megfelelően a két rendszer között egy-egyértelmű összefüggés van:

$$T_{l \max} \cdot T_{n-l \min} = T_n, \quad (25)$$

vagyis a két rendszer elemei egymásba átszámolhatók. A (24a) kötés miatt viszont csak $\{A_l\}$, $\left(1 \leq l \leq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor\right)$ alkot független, de láthatóan nem teljes rendszert. Ezeket a következő módon egészíthetjük ki független és teljes rendszerré: $\{A_l\}$, $\{T_{k \max}\}$, $\left(1 \leq l \leq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor, \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor < k \leq n\right)$. Ekkor

$$\left. \begin{aligned} T_{k \min} &= \frac{T_{k \max}}{A_{n-k}} \\ T_{l \max} &= \frac{T_n}{T_{n-l \min}}, \quad T_{l \min} = \frac{T_n}{T_{n-l \max}} \end{aligned} \right\} \begin{aligned} &\left(\left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor < k < n \right) \\ &\left(1 \leq l \leq \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor \right) \end{aligned} \quad (26)$$

illetve, ha n páros:

$$T_{n/2 \max} = \sqrt{A_{n/2} T_n}, \quad T_{n/2 \min} = \sqrt{\frac{T_n}{A_{n/2}}}. \quad (26a)$$

Az eddigiek mellett természetesen még számos módon képezhetnénk invariánsokat, de meggyőződésünk szerint az alkalmazások többségében éppen a fenti invariáns-rendszerek a legpraktikusabbak, egyben a számítások szempontjából is a legegyszerűbbek. Különösen képalkotások, képátvitel általános leírására tűnik célszerűnek ez a tárgyalás.

A torzulási invariánsok általános tárgyalása után vizsgáljuk meg, hogy leggyakrabban előforduló, kétdimenziós képeink torzulását milyen adatokkal lehet a legszemléletesebben leírni.

Két dimenzióban a torzulástenzornak két sajátértéke van, tehát két független invariánsat választhatunk. Célszerűnek látszik ezeket a kép kétdimenziós térfogat-torzulásában — a *területtorzulásban* — ill. a torzulási ellipszis nagy- és kistengelye arányában — az *aránytorzulásban* — megjelölni:

$$T_2 = \sqrt{\lambda_1 \lambda_2}, \quad (22a) \quad A = \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}}. \quad (24b)$$

E két jellemző jól alkalmazható torzult képek minősítésére, hiszen az aránytorzulásnak, ill. a helyi és átlagos területtorzulás viszonyának határait megadva, két adattal nyújthatunk megbízható információt a torzult kép minőségéről. (Feltétlenül megbízhatóbbat, mint pl. a TV-képek minősítésének mai mérőszám-rendszere, amely szerint egy szinkronhibából, vagy hálózati zavarból eredő sorcsúszás miatt élvezhetetlen kép a függőleges-vízszintes linearitás, párnatorzítás adataiban semmi rendellenességet nem mutat.)

Vizsgáljuk meg, hogy hogyan határozható meg a terület- és aránytorzulás a γ_{ij} torzulástenzor ismeretében. A (16) karakterisztikus egyenletet a következő, jól ismert formába fejthetjük ki:

$$\lambda^2 - \lambda \Gamma_1 + \Gamma_2 = 0. \quad (16a)$$

Γ_2 a torzulástenzor *determinánsa*, Γ_1 a *spurja*. E két invariáns kartéziusi rendszerben a következő módon számolható:

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_1 &= \gamma_{ii} = \gamma_{11} + \gamma_{22} \\ \Gamma_2 &= \gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{12}\gamma_{21} \end{aligned} \right\}. \quad (27)$$

A (16a) egyenlet két megoldása a két sajátérték. A másodfokú egyenlet gyökképletei szerint $\Gamma_2 = \lambda_1 \lambda_2$, tehát

$$T_2 = \sqrt{\Gamma_2}. \quad (28)$$

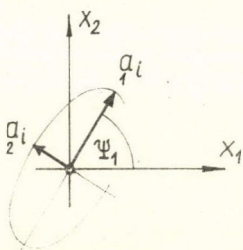
Az aránytorzulás kifejezéséhez meg kell oldanunk a (16a) egyenletet.

$$A = \sqrt{\frac{\lambda_2}{\lambda_1}} = \frac{\lambda_2}{\sqrt{\lambda_1 \lambda_2}} = \frac{1}{\sqrt{\Gamma_2}} \frac{\Gamma_1 + \sqrt{\Gamma_1^2 - 4\Gamma_2}}{2} = \frac{\Gamma_1}{2\sqrt{\Gamma_2}} + \sqrt{\left(\frac{\Gamma_1}{2\sqrt{\Gamma_2}}\right)^2 - 1},$$

$$\ln A = \operatorname{arch} \frac{\Gamma_1}{2\sqrt{\Gamma_2}}, \quad (29)$$

ahol felhasználtuk az $\operatorname{arch} x = \ln(x \pm \sqrt{x^2 - 1})$ összefüggést, és az *arch* függvény pozitív ágára szorítkoztunk. (A másik ág A reciprokát, $\sqrt{\lambda_1/\lambda_2}$ -t adná ki). Még egyszerűbben számolható az aránytorzulás a $\gamma_{12} = \gamma_{21} = 0$ speciális, de gyakran előforduló esetben. Ekkor ugyanis

$$A = \begin{cases} \sqrt{\gamma_{11}/\gamma_{22}} & \text{ha } \gamma_{11} \geq \gamma_{22}, \\ \sqrt{\gamma_{22}/\gamma_{11}} & \text{ha } \gamma_{11} < \gamma_{22}, \end{cases} \quad (29a)$$



3. ábra

ami (20a) és (24b) alapján adódik.

Meg kell itt jegyeznünk, hogy az aránytorzulás és a szögek eltorzulása között egyértelmű kapcsolat van. Egy derékszög maximálisan torzult megfelelője, $\tilde{\varphi}$ így számolható:

$$\operatorname{tg} \tilde{\varphi} = \frac{2A}{A^2 - 1}. \quad (30)$$

Az arány- és területtorzulásra most levezetett összefüggések különösen hasznosak lesznek a következő szakaszban, mert segítségükkel az általános koordinátákban adott torzulástenzorból is könnyen nyerhetünk jól kezelhető torzulásadatokat.

Továbbra is kétdimenziós képre és kartéziusi koordinátákra szorítkozva, vizsgáljunk meg egy nézőpontfüggő, relatív torzulásjellemzőt: a torzulási ellipszis tengelyeinek *beállási szögét* az x_1 koordinátatengely irányára vonatkoztatva. Az ellipszis tengelyeinek irányát a torzulástenzor a_i sajátvektorai tűzik ki, a beállási szögek tehát ezek komponenseivel fejezhetők ki (3. ábra):

$$\operatorname{tg} \Psi = \frac{a_2}{a_1}.$$

Induljunk ki a sajátvektorok meghatározására szolgáló (15) egyenletrendszer első sorából:

$$\gamma_{11}a_1 + \gamma_{12}a_2 - \lambda a_1 = 0 \quad (15a)$$

$$\frac{a_2}{a_1} = \frac{\lambda - \gamma_{11}}{\gamma_{12}} = \frac{\Gamma_1 \pm \sqrt{\Gamma_1^2 - 4\Gamma_2} - 2\gamma_{11}}{2\gamma_{12}},$$

$$\frac{a_2}{a_1} = \dots = \frac{\gamma_{22} - \gamma_{11}}{2\gamma_{12}} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma_{22} - \gamma_{11}}{2\gamma_{12}}\right)^2 + \frac{\gamma_{21}}{\gamma_{12}}}. \quad (31)$$

Ha figyelembe vesszük a γ -tenzort ábrázoló mátrix szimmetrikus voltát ($\gamma_{12} = \gamma_{21}$), és felhasználjuk az $\operatorname{arsh} x = \ln(x \pm \sqrt{x^2 + 1})$ összefüggést, nyerjük:

$$\ln \operatorname{tg} \Psi = \operatorname{arsh} \frac{\gamma_{22} - \gamma_{11}}{2\gamma_{12}}. \quad (31a)$$

Gondolnunk kell itt arra is, hogy az *arsh* függvény többértékű: ha $y = \operatorname{arsh} x$ fennáll, akkor $j\pi - y = \operatorname{arsh} x$ is igaz. Emiatt a (31a) összefüggés két adatot ad meg: a nagy- és kistengely beállási szögét — amik természetesen 90° eltérést mutatnak.

Visszatekintve torzításdefiníciókra, illetve a torzulástenzor segítségével végigvezetett leírásra, megállapíthatjuk, hogy a torzulatlan képelemet a torzulttal mindig azonos pontban hasonlítottuk össze. Ez a tény adott lehetőséget arra, hogy a képelem torzulásán kívül merevtestszerű elfordulását is értelmezzük.

Különböző terekben fekvő torzulatlan és torzult képelemek összehasonlításakor merevtestszerű elfordulás természetesen nem értelmezhető. Mi a helyzet abban az esetben, amikor a torzult és torzulatlan kép azonos térben foglal helyet? A merevtestszerű elfordulás definiálhatóságának ekkor nyilván az a feltétele, hogy létezzen egy *egyértelmű* eljárás a két képelem fedésbehozására; ezután a már tárgyalt leírás-mód szerint adódik az izometrikus tenzor. Az egyértelmű fedésbehozhatóság problémája az irodalomban részletes tárgyalásban is megtalálható: az *egyértelmű paraleleltolás*, vagy más néven *abszolút paralelizmus* feltételére pl. [5] és [6] is részletes bizonyítást tartalmaz. Mi csak a végeredményt idézzük: egyértelmű paraleleltolás csak euklideszi, azaz sík térben létezik.

A fenti eredmény nyilvánvaló következményeként megállapíthatjuk, hogy merevtestszerű elfordulásról csak *euklideszi térben beszélhetünk*. Az eddigieken túlmenően nem nehéz belátni, hogy a (3) és (5) által definiált I_{ik} izometrikus tenzorra további megkötések is vannak. Ha elfogadjuk a folytonos deformáció követelményét, akkor a torzulatlan kép görbéinek ugyancsak folytonos görbékbe kell átmenniük a torzulás folyamán. Viszont a görbék ívelemének összefüggését szintén H_{ij} határozza meg:

$$d\tilde{x}_i(x_p) = H_{ij}(x_p) dx_j. \quad (32)$$

Gondoljunk most a következő egyszerű esetre: $H_{ij}(x_p) = I_{ij}(x_p)$, vagyis $S_{kj}(x_p) \equiv \delta_{kj}$. (32) integrálhatóságára a differenciálegyenletek elméletéből jól ismert kritériumok állnak fenn ([6]), amelyek értelmében H_{ij} alakjának fenti megadásával csak a $H_{ij}(x_p) = I_{ij}$ konstans választás jöhet szóba. Hasonló helyzet áll elő akkor is, ha $S_{kj} \neq \delta_{kj}$.

Most már — a részletes bizonyítást mellőzve — leszögezhetjük, hogy ha egy pontban ismerjük az izometrikus tenzort, akkor az integrálhatósági feltételek azt minden más pontban is meghatározzák a torzulás ismeretében; vagy másképpen kifejezve: az S_{kj} szimmetrikus rész pontonkénti ismeretében a pontonkénti merevtestszerű elfordulás is meghatározható egy egész képre kiterjedő állandó elfordulás erejéig. Az itt elmondottak folyományaképpen a torzulásviszonyoknak az egész képen való megadása a merevtestszerű szögelfordulást is meghatározza, emiatt ez utóbbival a továbbiakban nem is foglalkozunk.

2. A torzulástenzor általános bevezetése

Felmerül az a kérdés, hogy az előző szakaszban tárgyalt fogalmakat hogyan lehetne általánosan, az ott szereplő szükségtelen megszorítások nélkül bevezetni. Először is egyetlen pont környezetének vizsgálata helyett a teljes képtér torzulásvizzonyait kell tárgyalnunk. Ennek következtében nem tehetjük fel többé, hogy az egymáshoz rendelt torzulatlan ill. torzult térelemek azonos helyen találhatók, vagyis a torzulástenzor most már egymástól többé-kevésbé függetlenül elhelyezkedő terek között teremt kapcsolatot. Másodszor: a tárgyalás általánossága érdekében általános koordinátákat használunk. Lényeges kikötés, hogy mind a *tárgytér*, mind a *képtér* (tágabb értelemben) metrikus legyen (ez természetesen előfeltétele annak, hogy egyáltalán torzulásról beszélhessünk). Ez a kikötés esetünkben csak annyit jelent, hogy vizsgált tartományunk minden pontján definiálhatók kontravariáns és kovariáns vektorok, valamint létezik egy köztük kapcsolatot teremtő szimmetrikus mértéktenzor (g_{ij}). A levezetések során mindenhol feltesszük a koordinátafüggvények differenciálhatóságát [4], [5].

Feladatunk tehát a két objektum, a *tárgy* és a *kép* geometriai (ill. geometriailag jellemezhető) kapcsolatának általános vizsgálata. E kapcsolat egyik oldala, a tárgy és kép közötti eltérés — *különbség*: e különbség egy elemének — a torzulásnak — kvantitatív leírása a vizsgálatunk tulajdonképpeni célja. A kapcsolat másik oldalaként a tárgy és a kép között *azonosság* is mutatkozik. Az azonosság mibenléte további tárgyalásunk korlátait is megszabja: feltételezzük a tárgy és a kép topológiai homeomorf voltát. Ez azt jelenti, hogy a tárgy és a kép pontjainak egymáshozrendelése kölcsönösen egyértelmű és kölcsönösen folytonos, ami egyben maga után vonja, hogy a leképezés dimenziótartó.

Az analitikus tárgyalás érdekében a tárgy ill. a kép által kifesztett teret koordinátarendszerbe kell ágyaznunk. A továbbiakban olyan típusú beágyazásokra szorítkozunk, melyeknél a kép és a tárgy pontjai ill. koordinátái között az egymáshozrendelés egy-egyértelmű és kölcsönösen folytonos [5], [6]. A két beágyazás egymástól függetlenül is történhetne, ekkor azonban külön formulát kellene keresni a tárgy- és képpontok egymáshozrendeltségének leírására. (A beágyazásnál tett megszorítások folytán e torzulást jellemző függvénykapcsolat tükrözni képes a tárgy és kép közötti kapcsolat homeomorf voltát, ugyanis ebben az esetben a függvénykapcsolat is egy-egyértelmű és kölcsönösen folytonos.) Célszerűségi okokból a beágyazást válasszuk meg úgy, hogy a tárgy- és képtér egyes pontjainak egymáshozrendelését az

$$\tilde{x}^i(\tilde{P}) = x^i(P) \quad (1)$$

összefüggés fejezze ki. (P a tárgytér, \tilde{P} a képtér egymáshoz rendelt pontja, x^i ill. \tilde{x}^i az ezekhez tartozó koordináta- n -esek.)

Az (1) feltevés az általánosságot nem érinti, hiszen ha a független beágyazás esetén a koordináta- n -esek egymáshozrendelését leíró formula

$$F[\tilde{x}^i(\tilde{P}); x^j(P)] = 0 \quad (2)$$

alakú volt, akkor az

$$F[\tilde{x}^i(P); x^j(P)] = 0 \quad (2a)$$

transzformációs összefüggéssel a tárgytérben új \tilde{x}^i koordinátákat vezetve be, a

megfelelő pontok koordinátáinak egymáshozrendelését most már az

$$\tilde{x}^i(\tilde{P}) = \bar{x}^i(P) \quad (1a)$$

összefüggés írja le.

A tárgyter tetszőleges P pontjának kis (pontosabban végtelenül kicsiny) környezete a képtér \tilde{P} pontjának ugyancsak kis (végtelenül kicsiny) környezetébe képeződik le. Hogy ezt a megfeleltetést egyszerűen tudjuk tárgyalni, olyan P ill. \tilde{P} pontban definiált mennyiségeket kell keresnünk, melyek legalább a kiválasztott pontok közvetlen környezetének leírására alkalmasak. Ilyen mennyiségeket a következő módon konstruálhatunk. Képezzünk egy olyan, P ponton áthaladó sima görbék-ből álló görbesereget, mely a P pont szóban forgó kis környezetét sűrűn befedi. Minden egyes görbéhez rendeljük paraméterváltozóként a P ponttól mért ívhosszúságot. (Azokat a szinguláris görbéket, melyeknél ez nem tehető meg, vizsgálatunkból kirekesztjük.) Egy fentieknek megfelelően definiált

$$x^i = x^i(s) \quad (3)$$

görbéből képezhetjük az

$$u^i(P) = \frac{dx^i(s)}{ds} \quad (4)$$

mennyiséget, természetesen minden görbéhez külön-külön. Nyilvánvaló, hogy $u^i(P)$ kontravariáns vektor, és abszolútértéke 1.

Fenti görbeseregünk megfelelője a \tilde{P} pont környezetét fedi be a homeomorfia értelmében. Mivel a (3) alakú kiragadott görbe az (1) összefüggésnek megfelelően az

$$\tilde{x}^i = \tilde{x}^i(s) = x^i(s) \quad (5)$$

görbébe megy át,

$$\tilde{u}^i(\tilde{P}) = \frac{d\tilde{x}^i(s)}{ds} = \frac{dx^i(s)}{ds} = u^i(P) \quad (6)$$

is fennáll. Gondolnunk kell arra, hogy az utóbbi esetben s már nem ívhosszparaméter, és így $\tilde{u}^i(\tilde{P})$ nem is egységvektor. A kontravariáns komponensekre kapott (6) összefüggés csupán (1) következménye, a kovariáns komponensekre nem áll fenn.

Tetszőleges koordinátarendszerben két vektor skaláris szorzatát a mértéktenzorból és a két vektor komponenseiből alkotott bilineáris forma adja. Így pl. a skalárszorzat a tárgyter x^i koordinátarendszerében

$$(u, v) = g_{ij}(P) u^i(P) v^j(P), \quad (7)$$

ahol u^i és v^j két, (4) alakú képlet által meghatározott, egyébként tetszőleges vektor. A képtérben ennek mintájára

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = \tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) \tilde{u}^i(\tilde{P}) \tilde{v}^j(\tilde{P}). \quad (8)$$

Szeretnénk az (\tilde{u}, \tilde{v}) képtérbeli skalárszorzatot a tárgyterbeli u^i ill. v^j vektorok segítségével képezni. Ez (6) figyelembevételével könnyen sikerül:

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = \tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) u^i(P) v^j(P). \quad (9)$$

(9) *tenzoregyenlet* a tárgyterben, ugyanis u^i és v^j vektor a P pontban, (\tilde{u}, \tilde{v}) pedig a P ponthoz rendelt invariáns skalár. Így (9) $\tilde{g}_{ij}(\tilde{P})$ -t P pontbeli tenzorként definiálja a tárgyterben.

Egyenletünk kapcsolatot teremt a tárgytérbeli egységvektorok, valamint képtérbeli megfelelőik skalárszorzata között. Tekintsük tehát egy ilyen

$$(\tilde{u}, \tilde{v}) = \gamma_{ij}(P) u^i(P) v^j(P) \quad (10)$$

alakú tenzorösszefüggésben az összefüggés módját megadó γ_{ij} tenzort a torzulás jellemzőjének, azaz *torzulástenzornak*. (9) és (10) összevetésével ez a torzulástenzor közelebből is meghatározott:

$$\gamma_{ij}(P) = \tilde{g}_{ij}(\tilde{P}). \quad (11)$$

(Belátható, hogy általánosabb kiindulási feltételek esetén is egyedül a γ_{ij} torzulástenzor szükséges a két objektum megfelelő pontjainak kis környezetében a geometriai eltérések, azaz a torzulás leírására. Ugyanis a geometriai különbségek teljes rendszere ismert, ha meg tudjuk adni a tárgytér szóban forgó pontjában definiálható összes geometriai invariáns képtérbeli megfelelőjét. Ehhez pedig a differenciálgeometriából ismert módon ([4], [6]) a képtérbeli pontban csak a mértéktenzor és deriváltjainak ismerete szükséges, amivel esetünkben egyenértékű a mértéktenzor ismerete az adott terek *minden* pontjában — a differenciálhatóságra tett kikötések mellett.)

Tekintettel arra, hogy a mértéktenzor mindenképpen szimmetrikus, a torzulástenzor ugyancsak szimmetrikus lesz.

Térjünk vissza a (10) egyenletre, és hasonlítsuk össze az előző szakasz (1.9) összefüggésével. Látható, hogy (10)-ben (1.9) általánosítását kaptuk, így a sajátérték-egyenlet alapján végzett megfontolások megfelelő általánosítással itt is alkalmazhatók. A sajátérték-egyenlet most a következő alakot ölti [4]:

$$(\gamma_{ij} - \lambda g_{ij}) u^j = 0, \quad (12)$$

$$\det |\gamma_{ij} - \lambda g_{ij}| = 0. \quad (12a)$$

Az egyenlet által szolgáltatott (valós vagy komplex) sajátértékekből továbbra is az (1.22)—(1.24) összefüggések alapján képezhetjük az első szakaszban bevezetett torzulásinvariánsokat.

A (12a) egyenlet mátrixdeterminánsa helyett az ettől csak konstansban eltérő invariáns-determináns segítségével a karakterisztikus egyenlet így írható [6]:

$$0 = \frac{1}{n!} \varepsilon^{r_1 r_2 \dots r_n} \varepsilon^{s_1 s_2 \dots s_n} (\gamma_{r_1 s_1} - \lambda g_{r_1 s_1}) (\gamma_{r_2 s_2} - \lambda g_{r_2 s_2}) \dots (\gamma_{r_n s_n} - \lambda g_{r_n s_n}). \quad (13)$$

Itt $\varepsilon^{r_1 r_2 \dots r_n}$ a Levi-Civita-féle tenzor, melynek definíciója „jobbsodrású” rendszerben:

$$\varepsilon^{r_1 r_2 \dots r_n} = g^{-\frac{1}{2}} e_{r_1 r_2 \dots r_n}; \quad e_{r_1 r_2 \dots r_n} = \begin{cases} 0, & \text{ha legalább két index megegyezik} \\ 1, & \text{ha az indexek páros permutációt alkotnak} \\ -1, & \text{ha az indexek páratlan permutációt alkotnak} \end{cases}$$

ahol e az antiszimmetrikus egységmátrix, és g a kovariáns mértéktenzor mátrix-determinánsa.

A binomiális tétel felhasználásával (13) a következő alakot ölti:

$$0 = \sum_{l=0}^n (-1)^{n-l} \lambda^{n-l} \Gamma_l, \quad (14)$$

ahol

$$\Gamma_l = \frac{1}{(n-l)! l!} \varepsilon^{r_1 r_2 \dots r_n} \varepsilon^{s_1 s_2 \dots s_n} \gamma_{r_1 s_1} \dots \gamma_{r_l s_l} g_{r_{l+1} s_{l+1}} \dots g_{r_n s_n}. \quad (15)$$

Mivel (15) jobb oldalán csak tenzorok állnak, a Γ_l mennyiségek invariánsok. $\Gamma_1, \dots, \Gamma_n$ a γ_{ij} tenzor invariánsai, $\Gamma_0 = 1$. Az invariánsok kifejezése lényegesen egyszerűsödik, ha a γ_{ij} torzulástenzort a

$$\gamma^k_j(P) = g^{ki}(P) \gamma_{ij}(P) = g^{ki}(P) \tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) \quad (16)$$

vegyes alakban használjuk fel. Ekkor (15)-ben az ε -tenzorok egyikét kovariáns formába kell írunk, s az egyenletbe az egységmátrixszal ábrázolható vegyes mérték-tenzort kell helyettesítenünk. A következő egyszerű összefüggést kapjuk:

$$\Gamma_l = \frac{1}{(n-l)! l!} e_{r_1 \dots r_l r_{l+1} \dots r_n} e_{s_1 \dots s_l r_{l+1} \dots r_n} \gamma^{r_1}_{s_1} \dots \gamma^{r_l}_{s_l}. \quad (15a)$$

A következőkben összefoglaljuk a torzulásjellemzők általános számítási módszerét. Legelső lépésként a tárgyat és a képet célszerűen választott koordináta-rendszerbe ágyazzuk, ügyelve az (1) kikötésre. Megállapítjuk mindkét koordináta-rendszerben a mértéktenzort a hely függvényeként. A (16) összefüggés segítségével nyerjük a P pont koordinátáinak függvényében a torzulástenzort. A Γ_l invariánsok meghatározása ((15a)) után a sajátértékek (14)-ből számolhatók. Ezekből nyerhetjük a különböző torzulásjellemzőket a hely függvényében. Az utóbbi két lépés egyégy vonható össze, ha a torzulásjellemzőket már előzőleg a Γ_l invariánsokkal közvetlenül kifejeztük, mint pl. az előző szakaszban két dimenzióban bevezetett arány- és területtorzulási összefüggésben.

Végül megvizsgáljuk most nyert általános eredményeinket kétdimenziós tárgyra és képre vonatkozóan, s egyben megmutatjuk, hogy a gyakorlati számításokhoz a torzulástenzor vegyes alakja a legcélszerűbb. A kétdimenziós γ^i_j két invariánsát (15a) szerint képezve:

$$\left. \begin{aligned} \Gamma_1 &= e_{r_1 r_2 s_1 r_2} e_{s_1 r_2 s_1 r_2} \gamma^{r_1}_{s_1} = \gamma^1_{\cdot 1} + \gamma^2_{\cdot 2} \\ \Gamma_2 &= \frac{1}{2} e_{r_1 r_2 s_1 s_2} e_{s_1 s_2 r_1 r_2} \gamma^{r_1}_{s_1} \gamma^{r_2}_{s_2} = \gamma^1_{\cdot 1} \gamma^2_{\cdot 2} - \gamma^1_{\cdot 2} \gamma^2_{\cdot 1} \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

az előző fejezet (1.27) egyenletével egyező összefüggésre jutottunk. Amíg tehát a torzulástenzor kovariáns ill. kontravariáns alakjából csak a mértéktenzor egyidejű felhasználásával nyerhetjük az invariánsokat (lásd (15) egyenlet), a torzulástenzort vegyes formában ábrázoló mátrix *önmagában* adja ezeket — méghozzá a kartéziusi rendszerben történő invariánsképzéssel teljesen egyező szabályok szerint.

Az arány- és területtorzulás tehát (1.28), (1.29) és (17) segítségével minden további nélkül képezhető. A torzulási indikatrixalakzat beállításának kérdését viszont részletesebben meg kell vizsgálnunk. A γ^i_j -t vegyes alakban ábrázoló mátrix

ugyanis nem feltétlenül szimmetrikus; csupán annyit tudunk, hogy két lehetséges formája egymásnak a főátlóra vonatkozó tükörképe:

$$\gamma_{.j}^i = \gamma_j^i = \gamma_j^i.$$

A (12) sajátértékegyenletet vegyes alakra átírva

$$(\gamma_j^i - \lambda \delta_j^i) u^j = 0, \quad (12b)$$

majd ennek „első sorát” kiemelve

$$\gamma_1^1 u^1 + \gamma_2^2 u^2 - \lambda u^1 = 0$$

(1.15a)-val azonos formájú összefüggésre jutottunk. A sajátvektorok kontravariáns komponenseinek arányát tehát (1.31)-gyel egyezően adhatjuk:

$$\frac{a^2}{a^1} = \frac{\gamma_2^2 - \gamma_1^1}{2\gamma_2^1} \pm \sqrt{\left(\frac{\gamma_2^2 - \gamma_1^1}{2\gamma_2^1}\right)^2 + \frac{\gamma_1^2}{\gamma_2^1}}, \quad (18)$$

vagy:

$$\ln \frac{a^2}{a^1} = 0,5 \ln \frac{\gamma_1^2}{\gamma_2^1} + \operatorname{arsh} \frac{\gamma_2^2 - \gamma_1^1}{2\sqrt{\gamma_2^1 \gamma_1^2}}. \quad (18a)$$

Ezek ismeretében a sajátvektorok iránya, tehát a torzulási induktrix orientációja — a *beállítás* meghatározott.

3. A mértéktenzor meghatározása általános felületeken

Az előző szakaszban a torzulástenzor bevezetésével rögzítettük a tárgy- és képtér közötti torzulás általános leírásmódját. A torzulástenzor invariánsai segítségével közvetlen képet kaptunk a torzulás jellegéről, mértékéről. A minden további torzulásinformációt magában rejtő γ_j^i torzulástenzor kiszámítására azonban teljesen általános — és éppen emiatt az egyedi esetekre nem túl sokat mondó — utasítást adtunk. A (2.16) alatti

$$\gamma_j^k(P) = g^{ki}(P) \tilde{g}_{ij}(\tilde{P})$$

összefüggés ugyanis csak akkor ér valamit, ha ismerjük a tárgy- és képtér egymáshoz rendelt pontjaiban a mértéktenzorokat, ami általános tárgy- és képpontrendszer mellett nem lebecsülendő követelmény.

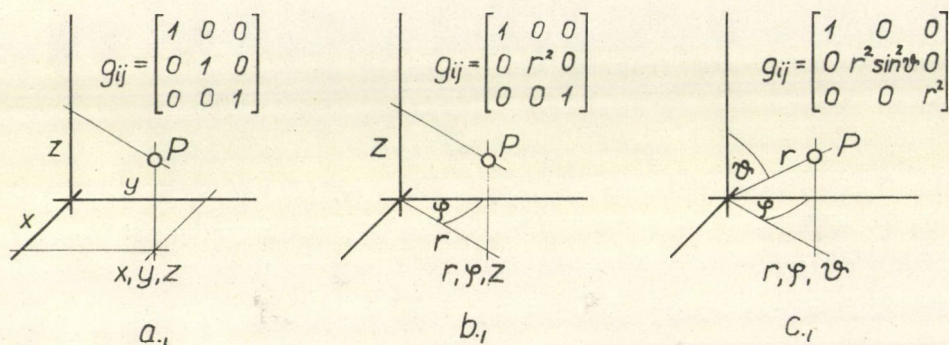
Ez a szakasz éppen a számítások megkönnyítését célozza, amikor általános módszert ad tetszőleges koordinátahálózattal bíró, háromdimenziós euklideszi térbe ágyazható kétdimenziós görbe felületek pontjaiban a mértéktenzor meghatározására. Az eredmények számításaink jó részében hasznosak lesznek, hiszen torzult képeink — a kupolafreskótól a cinerama-mozivázig — gyakran jelennek meg kétdimenziós görbe felületen.

Módszerünk kiindulásaként a vizsgált felületet valamilyen triviális, euklideszi térben értelmezett háromdimenziós koordinátarendszerbe ágyazzuk. Itt elsősorban a derékszögű-, a henger- és a gömbkoordináták jönnek számításba; ezek mérték-

tenzorai jól ismertek (l. 4. ábra). Ha a felület, amelyen a mértéktenzort keressük, éppen az egyik (a továbbiakban az egyszerűség kedvéért mindenütt a harmadik) koordináta egy szintfelületével esik egybe, különösebb gondjaink nincsenek. Ekkor ugyanis a felületre szorítkozás, a „felületen maradás” egyértelmű azzal az állítással, hogy a felület bármely pontjában felvett kontravariáns vektorok harmadik komponense zérus. A mértéktenzort tartalmazó összefüggésekben, mint pl. az

$$(a, b) = g_{ij} a^i b^j$$

kifejezésben nincs tehát szerepe a kovariáns mértéktenzor harmadik sorának és oszlopának. Ezek törlésével a kétdimenziós felületi mértéktenzort kaptuk meg.



4. ábra

Ha a vizsgált felület és egy szintfelület egybeesésének szerencsés esete nem áll fenn, alkalmas koordinátatranszformációval ez a helyzet létrehozható. Általános megoldást jelent tehát az alábbi műveletsorozat:

a) Kiindulás a már említett triviális beágyazás: \bar{x}^z . (A görög indexek most és a továbbiakban 1-től 3-ig futó számokat jelentenek.)

b) Következő lépésünk a felület második beágyazása: x^z . Ebben az új koordinátarendszerben a vizsgált felület feltétlenül szintfelület kell legyen — pl. $x^3 = 0$. x^1 és x^2 tetszőleges lehet (felvételüknél célszerű azonban figyelembe venni, hogy ezeknek a további számítások során egy (2.1) jellegű összefüggést kell kielégíteni). Ha az \bar{x}^z rendszerben a felület így ábrázolható:

$$\bar{x}^z = f_z(x^1; x^2) \quad (1)$$

(ahol x^1 és x^2 — a kívánt új felületi koordináták — mint paraméterek szerepelnek), akkor a b) alatti követelményeket pl. az alábbi összefüggéssel definiált x^z rendszer elégíti ki:

$$\bar{x}^z = f_z(x^1; x^2) + x^3 \bar{m}^z, \quad (2)$$

ahol az \bar{m}^z vektor úgy változik a felület mentén, hogy seholsem tűnik el a felületre merőleges összetevője, és a felület mentén differenciálható.

A vizsgált $x^3=0$ felület mentén a koordinátaderiváltak:

$$d_{\alpha\beta} = \frac{\partial \bar{x}^\alpha}{\partial x^\beta} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x^1} & \frac{\partial f_1}{\partial x^2} & \bar{m}^1 \\ \frac{\partial f_2}{\partial x^1} & \frac{\partial f_2}{\partial x^2} & \bar{m}^2 \\ \frac{\partial f_3}{\partial x^1} & \frac{\partial f_3}{\partial x^2} & \bar{m}^3 \end{bmatrix} \quad (3)$$

c) Ezek után (3) segítségével az \bar{x}^α triviális beágyazás ismert $\bar{g}_{\alpha\beta}$ mértéktenzorát átttranszformáljuk az x^α rendszerbe: $g_{\alpha\beta}$. Mivel x^α -ban felületünk szintfelület, itt $g_{\alpha\beta}$ harmadik sora és oszlopa törlésével a felületi mértéktenzort nyerjük. Ezeket a felesleges komponenseket nem is érdemes kiszámolnunk; elegendő csak a két-dimenziós felületi mértéktenzort képezni:

$$g_{ij} = \frac{\partial \bar{x}^\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^\beta}{\partial x^j} \bar{g}_{\alpha\beta}. \quad (4)$$

Megfigyelhetjük, hogy ebben az összefüggésben (3) utolsó oszlopa nem is kerül felhasználásra, a transzformációt tehát csupán a koordinátaderiváltak 3×2 -es mátrixával (tulajdonképpen (1) deriváltjaival) végezzük:

$$\frac{\partial \bar{x}^\alpha}{\partial x^i} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^1} & \frac{\partial \bar{x}^1}{\partial x^2} \\ \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^1} & \frac{\partial \bar{x}^2}{\partial x^2} \\ \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^1} & \frac{\partial \bar{x}^3}{\partial x^2} \end{bmatrix} \quad (5)$$

A fenti gondolatmenettel igazoltuk a dimenziócsökkenéssel járó koordináta-transzformációra vonatkozó transzformációs szabályt; a továbbiakban a most nyert (4) és (5) végeredményeket fogjuk felhasználni.

A módszer alkalmazását egy példán mutatjuk meg. Az R sugarú gömbfelület mértéktenzorát keressük, a 4c ábrával egyezően értelmezett φ és ϑ felületi koordináták mellett. (A feladat az ellenőrizhetőség kedvéért ilyen egyszerű.) Ismertnek csak a kartézisi koordináták mértéktenzorát tekintjük, tehát az

a) triviális beágyazás az x, y, z derékszögű koordinátákban történik; $\bar{g}_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$. Az (1)-nek megfelelő összefüggéseink:

$$x = R \cdot \sin \vartheta \cdot \cos \varphi \quad x, y, z \Rightarrow \bar{x}^\alpha$$

$$y = R \cdot \sin \vartheta \cdot \sin \varphi \quad \varphi, \vartheta \Rightarrow x^i$$

$$z = R \cdot \cos \vartheta$$

A *b)* beágyazásra vonatkozó (2) összefüggést nem szükséges felírni, elegendő, ha az (5) koordinátaderiváltakat képezzük:

$$\frac{\partial \bar{x}^z}{\partial x^i} = \begin{bmatrix} -R \sin \vartheta \sin \varphi & R \cos \vartheta \cos \varphi \\ R \sin \vartheta \cos \varphi & R \cos \vartheta \sin \varphi \\ 0 & -R \sin \vartheta \end{bmatrix}.$$

c) (4) segítségével elvégezzük a transzformációt:

$$g_{ij} = \frac{\partial \bar{x}^z}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^z}{\partial x^j} = \begin{bmatrix} R^2 \sin^2 \vartheta & 0 \\ 0 & R^2 \end{bmatrix}.$$

A módszer eredményeként tehát a gömbfelület mértéktenzorát nyertük a felületi koordinátákra vonatkozóan. Ez az eredmény tényleg egyezik a 4c ábrán látható mértéktenzorral, ha annak első sorát és oszlopát töröljük, és $r=R$.

A szakasz eddigi részében megadtuk és példával illusztráltuk a mértéktenzor meghatározásának általános módszerét. A továbbiakban az általános módszerből lezármasztatható eljárásokkal foglalkozunk.

A *lokális beágyazás módszere* azonos az *a)*—*c)* pontokba foglalt általános eljárással, azzal a megszorítással, hogy az x^i új felületi koordináták megegyeznek az eredeti \bar{x}^z beágyazás két koordinátájával. (Természetesen \bar{x}^1 - és \bar{x}^2 -nek ki kell elégítenie a koordinátabeágyazásra vonatkozó általános követelményeket.) (1) alakja ebben az esetben:

$$\begin{aligned} \bar{x}^1 &= x^1 \\ \bar{x}^2 &= x^2 \end{aligned} \quad (1a)$$

$$\bar{x}^3 = f_3(x^1; x^2),$$

és a koordinátaderiváltak:

$$d_{ai} = \frac{\partial \bar{x}^z}{\partial x^i} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{\partial f_3}{\partial x^1} & \frac{\partial f_3}{\partial x^2} \end{bmatrix}. \quad (5a)$$

A felületi mértéktenzort továbbra is (4) segítségével számolhatjuk.

Érdemes elgondolkozni azon, hogy a felület milyen adatait használtuk fel a mértéktenzor meghatározásához; tulajdonképpen csak az (5a) utolsó sorában levő két differenciálhányados volt szükséges. Ezt a következő gondolatmenettel szemléltethetjük. (2) utolsó sorát:

$$\bar{m}^3 x^3 = \bar{x}^3 - f_3(x^1; x^2) = \bar{x}^3 - f_3(\bar{x}^1; \bar{x}^2)$$

skalár-vektor függvénynek tekinthetjük az \bar{x}^z koordinátarendszerben. Ennek gradiensvektora:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{x}^i} (\bar{m}^3 x^3) = \left(-\frac{\partial f_3}{\partial \bar{x}^1}; -\frac{\partial f_3}{\partial \bar{x}^2}; 1 \right) = \left(-\frac{\partial f_3}{\partial x^1}; -\frac{\partial f_3}{\partial x^2}; 1 \right) \quad (6)$$

merőleges az $\bar{m}^3 x^3 = \text{const}$ felületekre, tehát a vizsgált $x^3=0$ -ra is. Ezek szerint

(5a) utolsó sorában a felület harmadik komponensre redukált normálvektorának első két komponense áll:

$$\frac{\partial \bar{x}^\alpha}{\partial x^i} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -\frac{n_1}{n_3} & -\frac{n_2}{n_3} \end{bmatrix}. \quad (7)$$

Az n_α komponensek az \bar{x}^α rendszerben értendők, és — (6)-ot és a gradiensvektor definíciószerűen kovariáns voltát figyelembe véve — kovariánsak.

Most nyert eredményeink érdekes megállapításokat tesznek lehetővé. g_{ij} meghatározásához nem szükséges explicite ismernünk a kérdéses felület egyenletét, elegendő, ha csupán a felületi normálist ismerjük a vizsgált pontokban. Ez a lehetőség egyes feladatok megoldásánál nagy könnyebbséget jelent; alkalmazásával a 6. példában találkozunk.

Ha a felületi normálvektor segítségével pontonként képeznénk a felület érintő-síkját, s az általános módszerünk *b)* lépéseként olyan helyi koordinátarendszert vennénk fel, melynek az *érintősík* a szintfelülete, a felületi mértéktenzort pontonként, *lokálisan* határozhatnánk meg. Ez a vizsgálat is (7)-tel egyező eredményre vezetne; ezért kapta a most leírt eljárás a „lokális beágyazás módszere” nevet.

A közös beágyazás módszere. Eddigi eljárásaink mind $g_{ij}(P)$, mind $\tilde{g}_{ij}(\tilde{P})$ számítására egyaránt alkalmasak. Egymástól nagymértékben függetlenül meghatározott tárgy- és képtér esetén nincs is más teendőnk, mint hogy az egymásnak megfelelő pontokban célszerű beágyazások segítségével külön-külön meghatározzuk a két mértéktenzort. Abban a gyakori esetben viszont, amikor a tárgy és a kép közös koordinátarendszerbe ágyazható, más út is kínálkozik a mértéktenzorok kiszámítására — legalábbis a tárgy- és képtér valamelyikében.

Legyen pl. a képpontok $x^z(\tilde{P})$ koordinátahármasa a tárgy beágyazó koordinátarendszerében s a tárgypontok $x^i(P)$ koordinátáitól függően a következő egyenletekkel adott:

$$x^z(\tilde{P}) = f_z[x^1; x^2(P)]. \quad (8)$$

A képre vonatkozó olyan új koordinátarendszert, mely (2.1) feltételünket teljesíti, a következő egyenletekkel vezethetünk be:

$$x^z(\tilde{P}) = f_z[\tilde{x}^1; \tilde{x}^2(\tilde{P})]. \quad (1b)$$

Ez az összefüggés hasonló az általános mértéktenzor-számítási módszer (1) kiinduló egyenletéhez; segítségével az ott látotthoz hasonló transzformáció végezhető el. Az eredmények különösen akkor kezelhetők jól, ha $x^i(P) = x^i(\tilde{P})$, ami viszont igen sok esetben fennáll. (Pl. minden vetítéssel feladatnál, a vetítési centrumban rögzített gömbkoordináta-rendszer φ és ϑ koordinátájára.)

Az eddigiek szerint

$$\left. \begin{aligned} x^1(\tilde{P}) &= x^1(P) = \tilde{x}^1(\tilde{P}) \\ x^2(\tilde{P}) &= x^2(P) = \tilde{x}^2(\tilde{P}) \\ x^3(\tilde{P}) &= f_3[\tilde{x}^1; \tilde{x}^2(\tilde{P})] \end{aligned} \right\}. \quad (2b)$$

A koordinátaderiváltak:

$$d_{\alpha i} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial \tilde{x}^i} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^1(\tilde{P})} & \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^2(\tilde{P})} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^1(P)} & \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^2(P)} \end{bmatrix} \quad (3b)$$

A kép új mértéktenzorát (4) segítségével így írhatjuk:

$$\tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) = g_{ij}(\tilde{P}) + g_{3i}(\tilde{P}) \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^j(P)} + g_{j3}(\tilde{P}) \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^i(P)} + g_{33}(\tilde{P}) \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^i(P)} \frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^j(P)} \quad (9)$$

A módszer lényege tehát: a képfelületi mértéktenzor számításának kiindulásként szolgáló ismert, „triviális” beágyazás a tárgy beágyazó koordináta-rendszere. Így viszonylag kényelmes transzformációval, s (2.1) egyidejű teljesítésével jutunk a kép mértéktenzorához.

A „közös beágyazás” módszerének alkalmazására az 5. példában kerül sor.

Az *illeszkedő felületek módszerét* akkor alkalmazhatjuk, ha a tárgy- és képfelület nem görbül ki egymásból, egymásra illeszkedik. Ebben az esetben nem kell a harmadik dimenziót segítségül hívnunk, a számításokat két dimenzióban is el tudjuk végezni.

Legyenek a felületi koordináták x^i , s az ismert mértéktenzor g_{ij} . Legyen a P tárgypontok és a \tilde{P} képpontok egymáshozrendelése a következő:

$$x^i(\tilde{P}) = f_i[x^1; x^2(P)]. \quad (10)$$

A képtérben (2.1)-et teljesítő új koordináta-rendszert vezethetünk be az alábbi egyenletekkel:

$$x^i(\tilde{P}) = f_i[\tilde{x}^1; \tilde{x}^2(\tilde{P})] \quad (1c)$$

A kép-koordináta-rendszer mértéktenzorát a tárgytéréből számolhatjuk:

$$\tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) = \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^i(\tilde{P})} \frac{\partial x^q(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^j(\tilde{P})} g_{pq}(\tilde{P}). \quad (11)$$

Ezek után a torzulástenzor

$$\gamma_j^k = g^{ki}(P) \tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) = g^{ki}(P) \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^i(\tilde{P})} \frac{\partial x^q(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^j(\tilde{P})} g_{pq}(\tilde{P}),$$

ami kartézisi x_i rendszerben az igen kényelmes

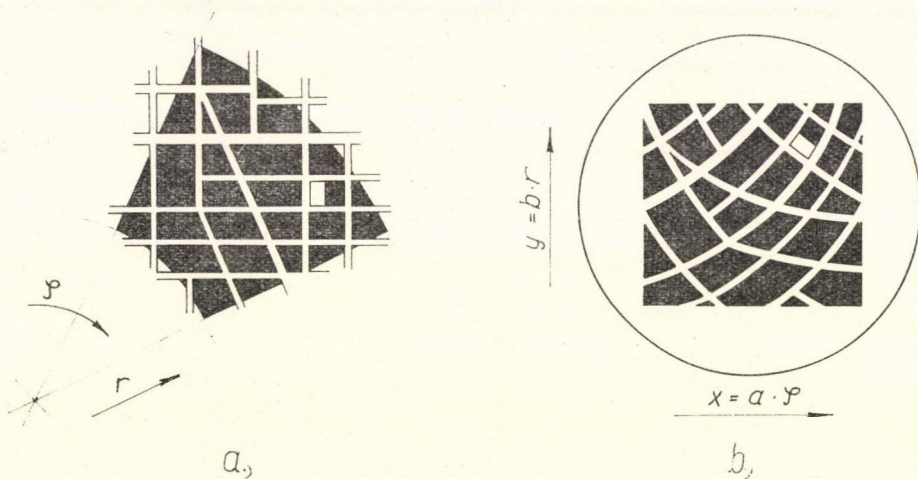
$$\gamma_j^k = \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^k(\tilde{P})} \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial \tilde{x}^j(\tilde{P})} = \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial x^k(P)} \frac{\partial x^p(\tilde{P})}{\partial x^j(P)} \quad (12)$$

formát veszi fel.

Ezt a módszert a 2. és 3. példában fogjuk felhasználni.

4. Alkalmazási példák

Az eddigiek során levezetéseinkben, eredményeinkben teljes általánosságra törekedtünk, éppen ezért nem eshetett szó az egyes alkalmazási lehetőségekről. Ezt a szakaszt arra szánjuk, hogy egy sor példán bemutassuk torzulásszámítási módszereink használható voltát. A példákkal egyben illusztrálni szeretnénk az ismertett számítási eljárások széleskörű alkalmazhatóságát.



5. ábra

1. feladatunkban a rádiólokátorok B típusú képének torzulását vizsgáljuk. Ebben az üzemmódban a lokátor körszektor-letapogatást végez, a letapogatott felület (5a. ábra, fekete terület) egyes pontjait az r rávolság és a φ oldalszög koordináták adják meg. A φ, r koordinátákkal arányos feszültségek viszont a derékszögű rendszerben rajzoló lokátor-képcső $x - y$ eltérítését vezérlik:

$$x = a \cdot \varphi \quad (1)$$

$$y = b \cdot r.$$

Az ernyőn megjelenő kép nyilvánvalóan torzult lesz (ami az 5b ábrán is jól látható).

Feladatunk a torzulástenzor, az arány- és területtorzulás valamint a beállítás meghatározása, a kép minden egyes pontjára vonatkozóan. Első lépésként mind a tárgyat, mind a képet alkalmas koordináta-rendszerbe ágyazzuk, ügyelve (2.1) betartására. Esetünkben a φ, r rendszer látszik célszerűnek. A továbbiakban meg kell állapítanunk a φ, r koordinátákra vonatkozó mértéktenzort — a tárgyon is, a képen is. A tárgyon φ és r polárkoordinátákat jelent, a mértéktenzor az ismert

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} r^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow g^{ij} = \begin{bmatrix} r^{-2} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

formájú. A kép mértéktenzorát csak a kartézusi $x, y(\tilde{x}^i)$ rendszerben ismerjük:

$\tilde{g}_{ij} = \delta_{ij}$. Ennek transzformációjával nyerhetjük a kép-mértéktenzort a $\varphi, r(\tilde{x}^i)$ rendszerben:

$$\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{x}^p}{\partial \tilde{x}^i} \frac{\partial \tilde{x}^q}{\partial \tilde{x}^j} \tilde{g}_{pq}.$$

A koordináta-deriváltak (1)-ből:

$$\frac{\partial \tilde{x}^i}{\partial \tilde{x}^j} = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{bmatrix}.$$

Ezzel az $\tilde{x}^i(\tilde{P}) = x^i(P)$ összefüggést teljesítő \tilde{x}^i rendszerben

$$\tilde{g}_{ij} = \begin{bmatrix} a^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{bmatrix}.$$

(2.16)-ból nyerjük a torzulástenzort a tárgy φ, r rendszerében:

$$\gamma_k^i = g^{ij} \tilde{g}_{jk} = \begin{bmatrix} a^2/r^2 & 0 \\ 0 & b^2 \end{bmatrix}.$$

A területtorzulás (1.28)-ból:

$$T = \sqrt{G_2} = \frac{ab}{r}.$$

Az aránytorzulás (1.29a) szerint:

$$A = \sup \left\{ \frac{rb}{a}; \frac{a}{rb} \right\}.$$

Láthatóan mind az arány-, mind a területtorzulás függ az r koordinátától. $A = 1$ (azaz nincs aránytorzulás) az $r = \frac{a}{b}$ helyeken; itt $T = b^2$, vagyis b -szeres nagyítás lép fel. A sajátvektorok irányára, tehát a torzulás beállítására (2.18) alapján a φ, r koordinátavonalak iránya adódik.

Hasonló módon tárgyalhatnánk a lokátorok C ill. E típusú ábrázolásának torzítását. Könnyen végezhető olyan vizsgálat is, mely az ábrázolás módjából „hivatalból” eredő, ill. a képcső-eltérítőrendszer hibáiból származó *együttes* torzulásra irányul.

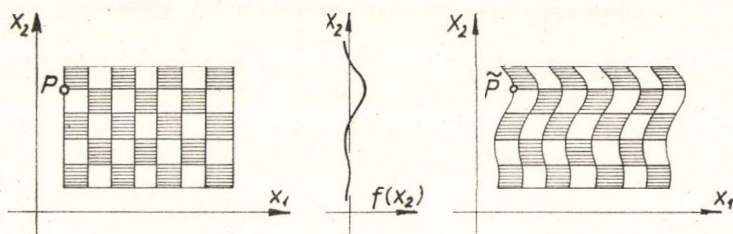
A 2. feladatban szereplő képtorzulás gyakori jelenség a televízió vevőkészülékeknél. Ha a vízszintes eltérítőjelre egy zavarójel szuperponálódik (pl. hálózati zavar, vagy szabályozási lengés a közvetett szinkron-áramkörben), a kép egyes sorai elcsúsznak egymáshoz képest; kellemetlen torzulást észlelünk. A 6. ábrán egy sakktábla-mintás TV-kép torzulását láthatjuk, az egyes sorok elcsúszásának mértékét az $f(x_2)$ függvény adja.

A példa megoldása során az eredeti és a torzult képet síkban elhelyezkedőnek tekintjük, és a 3. szakasz „illeszkedő felületek” módszerét alkalmazzuk. A torzult kép \tilde{P} pontjait (3.10)-nek megfelelően a torzulatlan kép kartézisi koordinátaiban adjuk:

$$\begin{aligned} x_1(\tilde{P}) &= x_1(P) + f[x_2(P)] \\ x_2(\tilde{P}) &= x_2(P) \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial x_i(\tilde{P})}{\partial x_j(P)} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{df}{dx_2} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Tekintettel az x_i rendszer kartéziusi voltára a torzulástenzort (3.12)-vel képezhetjük:

$$\gamma_{jk} = \frac{\partial x_p(\tilde{P})}{\partial x_j(P)} \frac{\partial x_p(\tilde{P})}{\partial x_k(P)} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{df}{dx_2} \\ \frac{df}{dx_2} & 1 + \left(\frac{df}{dx_2}\right)^2 \end{bmatrix}.$$



6. ábra

A torzulástenzor invariánsai:

$$\Gamma_2 = 1 + \left(\frac{df}{dx_2}\right)^2 - \left(\frac{df}{dx_2}\right)^2 = 1,$$

$$\Gamma_1 = 2 + \left(\frac{df}{dx_2}\right)^2,$$

tehát a területtorzulás (1.28): $T = \sqrt{\Gamma_2} = 1$, — ami az ábra alapján várható is volt. Az aránytorzulás (1.29):

$$A = \exp \left\{ \operatorname{arch} \frac{\Gamma_1}{2\sqrt{\Gamma_2}} \right\} = \exp \left\{ \operatorname{arch} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{df}{dx_2} \right)^2 \right] \right\}.$$

A gyakorlatilag érdekes $\frac{df}{dx_2} < 1$ esetben

$$A \approx \exp \frac{df}{dx_2}.$$

A Ψ beállási szög (1.31a)-ból

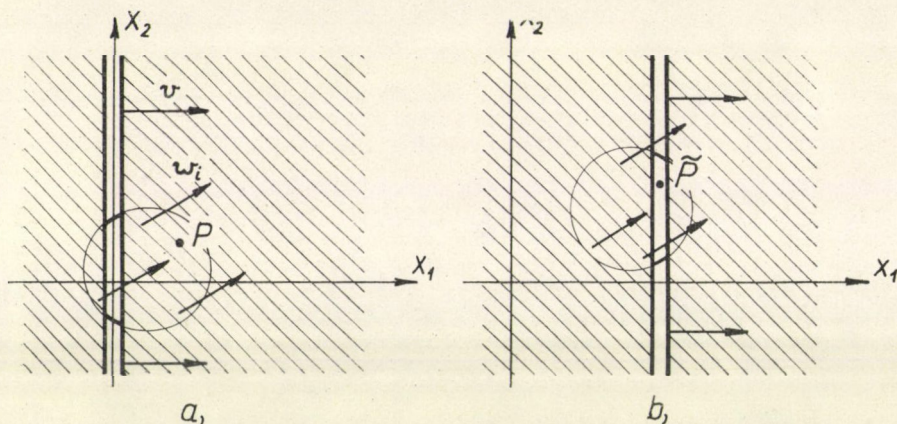
$$\ln \operatorname{tg} \Psi = \operatorname{arsh} \frac{\left(\frac{df}{dx_2}\right)^2}{2 \frac{df}{dx_2}} = \operatorname{arsh} \frac{1}{2} \frac{df}{dx_2}.$$

A hiperbolikus függvényekre vonatkozó összefüggéseket felhasználva:

$$\operatorname{tg} \Psi = A^{\pm \frac{1}{2}}.$$

A televíziós képátvitel során a torzulás változatos formái léphetnek fel — ezek közül most csupán egyet ragadtunk ki. Az ikonoszkóp trapéztorzítása, a nagy elté-

ritésszögű képcsövek párnatorzítása, torzulások a vízszintes-függőleges eltérítő áram nem megfelelő hullámformája miatt, a képernyő görbült voltából eredő torzulás — egytől egyig jól leírható a torzulástenzor segítségével.



7. ábra

3. feladat. A most vizsgálandó torzulás a redőnyzárás fényképezőgépeknél lép fel. Abban az esetben, ha mozgó tárgyat fényképezünk, és a tárgy fényképezőgépbeli vetületének sebessége (w_1) összemérhető a gép redőnyzár-sebességével (v), a tárgy képe a felvételen erős torzulást mutat. Erre a jelenségre alkalmazzuk most számítási módszerünket.

A vizsgálatot a következő feltevésekkel végezzük:

- a redőnyzár rését végtelenül keskenynek tekintjük,
- torzulatlanak a tárgy „ideális pillanatképét” tekintjük,
- feltételezzük a tárgy vetületének merevtestszerű mozgását,
- a $w_1 < v$ esetre szorítkozunk.

A vizsgálatot a fotolemezhez rögzített x_i kartéziusi koordinátákban végezzük. Legyen a balról jobbra mozgó rés a $t=0$ pillanatban éppen az $x_1=0$ helyen! Erre a pillanatra vonatkozik a 7a ábra. A tárgy torzulatlan vetülete pl. körlap, ennek egy P pontját külön megjelöltük. E pont képe csak később, a 7b ábra időpillanatában, a \tilde{P} helyen kerül a fotolemezre.

A 7a ill. 7b ábrán látható helyzet között eltelt időt két módon írhatjuk fel:

$$\frac{x_1(\tilde{P})}{v} = \frac{x_1(\tilde{P}) - x_1(P)}{w_1}.$$

Ezt felhasználva, a P és \tilde{P} pontok koordinátáinak kapcsolata:

$$\begin{aligned} x_1(\tilde{P}) &= x_1(P) \cdot \frac{v}{v - w_1} \\ x_2(\tilde{P}) &= x_1(P) \cdot \frac{w_2}{v - w_1} + x_2(P) \end{aligned} \quad \frac{\partial x_i(\tilde{P})}{\partial x_j(P)} = \begin{bmatrix} \frac{v}{v - w_1} & 0 \\ \frac{w_2}{v - w_1} & 1 \end{bmatrix}.$$

Ismét az illeszkedő felületek módszerét és (3.12)-t alkalmazzuk:

$$\gamma_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{v^2 + w_2^2}{(v - w_1)^2} & \frac{w_2}{v - w_1} \\ \frac{w_2}{v - w_1} & 1 \end{bmatrix}.$$

A torzulástenzor invariánsai:

$$\Gamma_2 = \dots = \frac{v^2}{(v - w_1)^2}$$

$$\Gamma_1 = \frac{v^2 + w_2^2 + (v - w_1)^2}{(v - w_1)^2}.$$

A terület- és aránytorzulás (1.28) és (1.29) alapján

$$T = \frac{v}{v - w_1}; \quad \ln A = \operatorname{arch} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{w_1^2 + w_2^2}{v(v - w_1)} \right].$$

A kapott eredmények változó sebességű tárgy esetén is érvényesek; minden pont környezetének torzulására a tárgyvületnek a rásátfutás pillanatában vett sebessége jellemző.

Eddigi példáink során mind a tárgy, mind a kép sík felületben feküdt. Az egymásra nem illeszkedő, egymásból „kigömbülő” felületek közti képtorzulásra vonatkozó példák sorát nyitja meg a

4. feladat. Milyen helyfüggő torzítással kell egy R sugarú félgömbkupolán a kupolafreskót elkészíteni, ha a kupola zenitje alatt $R + H$ mélységben álló szemlélőben azt a benyomást akarjuk kelteni, hogy a freskó egy, a félgömbbel azonos alapkörű, függőleges tengelyű hengerfelületen van (8. ábra)?

A feladatot más szavakkal így fogalmazhatjuk meg: a henger — mint tárgyfelfület — egyes pontjait a nézőponton átmenő egyenesekkel a gömbfelületre vetítjük. Milyen torzulás töltént?

A megoldás során úgy veszünk fel koordinátarendszert mindkét felületen, hogy az összetartozó pontok koordinátái kielégítsék (2.1)-et, s külön-külön meghatározzuk a felületi mértéktenzorokat.

A mindkét felületre vonatkozó koordináták legyenek ϑ és φ . A gömbfelület mértéktenzora az előzőekben már szerepelt:

$$\tilde{g}_{ij} = \begin{bmatrix} R^2 & 0 \\ 0 & R^2 \cdot \sin^2 \vartheta \end{bmatrix}.$$

A hengerfelület mértéktenzorát a 4. ábra alapján a z, φ koordinátákra tudjuk felírni:

$$\bar{g}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R^2 \end{bmatrix},$$

a ϑ, φ rendszerre áttéréshez ismerni kell az egy ponthoz tartozó z és ϑ értékek kap-

csolatát. A 8. ábra alapján írhatjuk:

$$\operatorname{ctg} \alpha = \frac{z - z_0}{R} = \frac{H + R \cos \vartheta}{R \sin \vartheta} = \frac{K + \cos \vartheta}{\sin \vartheta},$$

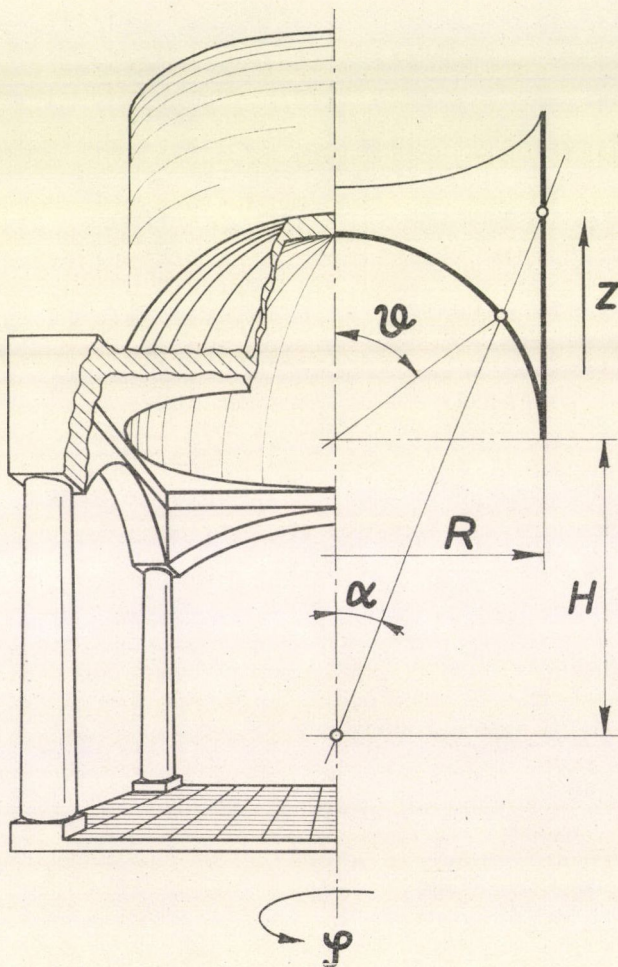
ahol

$$K = \frac{H}{R}.$$

A hengerfelület új ϑ , φ' koordinátáit a

$$z = z_0 + R \frac{K + \cos \vartheta}{\sin \vartheta} \quad \vartheta, \varphi \Rightarrow x^i$$

$$\varphi = \varphi' \quad z, \varphi' \Rightarrow \bar{x}^i$$



8. ábra

transzformációs összefüggéssel vezethetjük be. A koordináta-deriváltak:

$$\frac{\partial \bar{x}^i}{\partial x^j} = \dots = \begin{bmatrix} -R \frac{K \cos \vartheta + 1}{\sin^2 \vartheta} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Elvégezzük a mértéktenzor transzformációját:

$$g_{ij} = \frac{\partial \bar{x}^p}{\partial x^i} \frac{\partial \bar{x}^q}{\partial x^j} \bar{g}_{pq} = \begin{bmatrix} R^2 \frac{(K \cos \vartheta + 1)^2}{\sin^4 \vartheta} & 0 \\ 0 & R^2 \end{bmatrix}.$$

A hengerfelület ϑ, φ -re vonatkozó *kontravariáns* mértéktenzora pedig

$$g^{ij} = g_{ij}^{-1} = \frac{1}{R^2} \begin{bmatrix} \sin^4 \vartheta & 0 \\ (K \cos \vartheta + 1)^2 & 1 \end{bmatrix}.$$

A torzulástenzort (2.16) szerint képezzük:

$$\gamma_j^k = g^{ki} \tilde{g}_{ij} = \begin{bmatrix} \sin^4 \vartheta & 0 \\ (K \cos \vartheta + 1)^2 & \sin^2 \vartheta \end{bmatrix}.$$

(1.27—28—29a—31) felhasználásával

$$T = \sqrt{G_2} = \frac{\sin^3 \vartheta}{1 + K \cos \vartheta}; \quad A = \frac{1 + K \cos \vartheta}{\sin \vartheta};$$

a beállítás koordinátavonal-irányú.

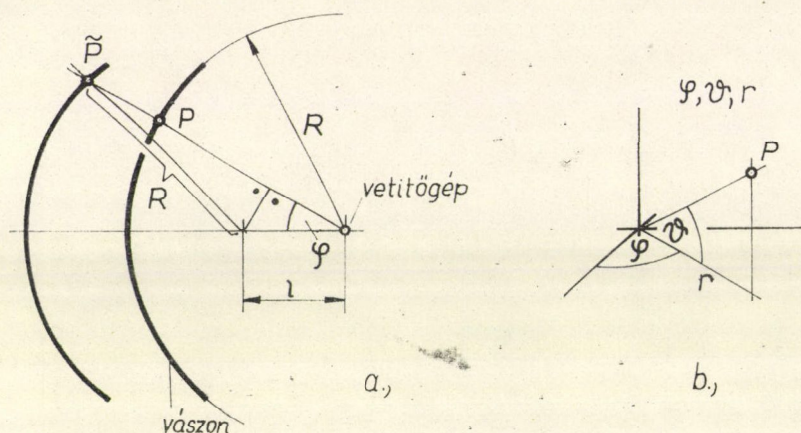
Hasonló módon oldhatjuk meg pl. a következő feladatokat:

- milyenek a torzulási viszonyok a számsík és a Riemann-számgömb között?
- milyen torzulás keletkezik azon a térképen, amelyet a Föld felületének a Föld középpontján átmenő egyenesekkel síkra (hengerre, kúpra) vetítésével nyerünk?
- hogyan változik egy gömbsugárzó fényforrás által létrehozott megvilágítás egy síkfelület mentén? (Utóbbi esetben olyan gömb-sík leképezést kell vizsgálnunk, ahol a vetítési pont a gömb-középpont; a megvilágítás a területtorzulás reciprokával arányos.)

Az 5. feladat az előzőhöz hasonlóan vetítéses jellegű. Tekintettel arra, hogy a kérdés bonyolult volta miatt a számítások hosszadalmasak, csak a megoldás fő lépéseit és a végeredményeket közöljük.

A cinerama-mozi vetítővászna R sugarú körhenger-felület része, a vetítógép a hengerfelület tengelyében áll. Az ebben a beállításban vetített képet torzulatlannak tekintjük. Mekkora torzulás lép fel, ha a vetítógépet a vászon-középpont felé (vagy tetszőleges irányban) l távolságra elmozdítjuk? (Ez a kérdés mindig fel kell merüljön, ha egy vászonra több helyhez kötött vetítógép dolgozik.)

A számítás során a vetítógép helyzetét tekintjük rögzítettnek, s a vetítővásznat toljuk el hozzá képest l távolságra (9a ábra). Eredményeink a teljes körhenger-vászonra érvényesek lesznek. Ha a vászonközéppontot a $\varphi=0$ helyre képzeljük (mint az ábrán), a megoldás a középpont felé való elmozdulásra vonatkozik; de ha pl. a középpont $\varphi=90^\circ$ -nál van, akkor a vetítógép—vászonközéppont irányra merőlegesen elmozdulás torzulásvizonyait kaptuk (egymás mellett álló vetítők esete).



9. ábra

A hengeres vászon miatt φ, z, r hengerkoordináták bevezetése volna kézenfekvő. Mégis célszerűbb lesz z helyett a ϑ magassági szög koordináta használata, így ugyanis a 3. szakasz „közös beágyazás” módszerével megkönnyíthetjük számításainkat. A kapott nem-ortogonális $\varphi, \vartheta, r(x^a)$ hengerkoordináták (9b ábra) mértéktenzora

$$g_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} r^2 & 0 & 0 \\ 0 & r^2/\cos^4 \vartheta & r \operatorname{tg} \vartheta/\cos^2 \vartheta \\ 0 & r \operatorname{tg} \vartheta/\cos^2 \vartheta & 1/\cos^2 \vartheta \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Tekintettel arra, hogy torzulatlan esetben a vászon a hengerkoordináták $r = R$ szintfelülete, a φ, ϑ koordinátákra vonatkozó felületi mértéktenzor

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} R^2 & 0 \\ 0 & R^2/\cos^4 \vartheta \end{bmatrix}; \quad g^{ij} = \begin{bmatrix} 1/R^2 & 0 \\ 0 & \cos^4 \vartheta/R^2 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

A \tilde{P} képpontok x^z -beli koordinátáit (3.8)-nak megfelelően a P tárgypontok koordinátaival fejezzük ki:

$$\varphi(\tilde{P}) = \varphi(P)$$

$$\mathfrak{g}(\tilde{P}) = \mathfrak{g}(P)$$

$$r(\tilde{P}) = l \cos \varphi + \sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}.$$

(A harmadik sort a 9a ábra két derékszögű háromszöge alapján írhatjuk fel.) Innen

$$\frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^1(P)} = \frac{\partial r(\tilde{P})}{\partial \varphi} = -l \sin \varphi \left(1 + \frac{l \cos \varphi}{\sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}} \right),$$

$$\frac{\partial x^3(\tilde{P})}{\partial x^2(P)} = \frac{\partial r(\tilde{P})}{\partial \vartheta} = 0. \quad (4)$$

\tilde{g}_{ij} számítására (3.9)-et, (2) és (4)-et használjuk fel. (3.9) négy tenzortagjának összegzését elvégezve

$$\tilde{g}_{ij}(\tilde{P}) = \dots = r^2 \begin{bmatrix} \frac{R^2 + l^2 \sin^2 \varphi \operatorname{tg}^2 \vartheta}{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi} & -\frac{\operatorname{tg} \vartheta}{\cos^2 \vartheta} \frac{l \sin \varphi}{\sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}} \\ -\frac{\operatorname{tg} \vartheta}{\cos^2 \vartheta} \frac{l \sin \varphi}{\sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}} & \frac{1}{\cos^4 \vartheta} \end{bmatrix}.$$

Ebből és (3)-ból (2.16)-al képezhetünk torzulástenzort:

$$\gamma_k^i = r^2 \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{l}{R} \right)^2 \sin^2 \varphi \operatorname{tg}^2 \vartheta & -\frac{\operatorname{tg} \vartheta}{\cos^2 \vartheta} \frac{l \sin \varphi}{R^2 \sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}} \\ -\operatorname{tg} \vartheta \cos^2 \vartheta \frac{l \sin \varphi}{R^2 \sqrt{R^2 - l^2 \sin^2 \varphi}} & \frac{1}{R^2} \end{bmatrix}.$$

Bevezetve a $K = \frac{l}{R} \sin \varphi$ jelölést, a területtorzulás

$$T = \sqrt{\Gamma_2} = \dots = \frac{r^2}{R^2 \sqrt{1 - K^2}},$$

az aránytorzulás

$$\ln A = \dots = \operatorname{arch} \frac{1 + \frac{K^2}{2} (\operatorname{tg}^2 \vartheta - 1)}{\sqrt{1 - K^2}},$$

és a beállítás

$$\ln \frac{a^2}{a^1} = \dots = 2 \ln \cos \vartheta - \operatorname{arsh} \frac{K}{\sin 2\vartheta \sqrt{1 - K^2}}.$$

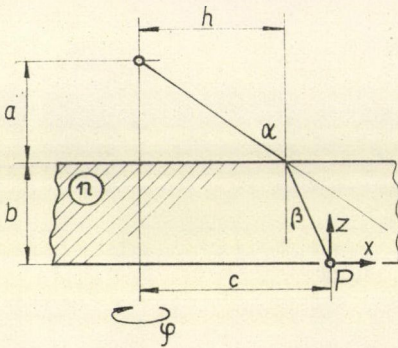
A 6. feladatban a plánparalel törőközeg által okozott torzulást vizsgáljuk meg. Az eredeti kép felett, azzal szorosan érintkezve b vastagságú, n törésmutatójú közeg fekszik. (Ilyen rendszert alkot pl. egy sikernyős katódsugárcső foszforrétegén keletkező kép és a ballon több mm vastag plánparalel homloklapja.) A képet a törőközeg felett a magasságban fekvő pontból, végtelenül kis aperturájú eszközzel nézzük (10. ábra). Az eszköz egy forgásfelületen elhelyezkedő virtuális képet lát. Milyen a torzulás a valódi kép és e virtuális kép között?

E feladattal a mértéktenzor-meghatározás „lokális beágyazás” módszerét kívánjuk példázni; a meglehetősen hosszadalmas számítás további lépéseit csak vázolni fogjuk.

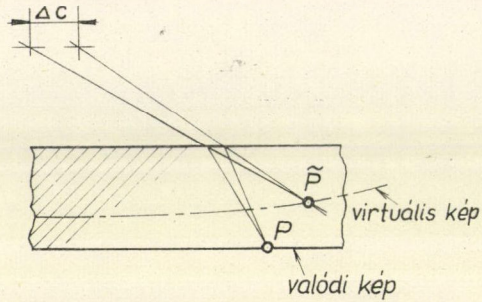
Mind a valódi, mind a virtuális képet a 10a ábra szerinti h, φ koordinátákkal írjuk le.

Első lépésünk a virtuális kép helyzetének meghatározása. A valódi kép egy P pontjához az x, z koordinátarendszert rögzítve, felírjuk a P -ből a nézőpontba befutó fénysugár-egyenes egyenletét:

$$z = a + b - \frac{a}{h(c)}(x + c) \quad (c \text{ jelentése az ábrán látható}).$$



a,



b,

10. ábra

Ezen az egyenesen lesz a virtuális kép \tilde{P} pontja. A nézőpont kis Δc elmozdításával másik ilyen egyenest kapunk (10b ábra), az igen kis aperturájú eszköz e két egyenes $\Delta c \rightarrow 0$ -ra vonatkozó metszéspontjában „látja” a virtuális kép \tilde{P} pontját. Abban a pontban lesz tehát \tilde{P} , melyre $\frac{dz}{dc} = 0$.

$$\frac{dz}{dc} = \frac{a}{h^2} \frac{dh}{dc} (x + c) - \frac{a}{h} = 0 \quad x + c = h \frac{dc}{dh}.$$

A virtuális kép felülete

$$r = h \frac{dc}{dh}$$

$$z = a + b - a \frac{dc}{dh}$$

a nézőpontból a plánparalel lemezre bocsájtott merőleges, mint tengely körüli forgásfelület, ahol $r = c + x$ az e tengelytől mért távolság.

Második részfeladatunk a valódi és a virtuális kép mértéktenzorának meghatározása.

A valódi kép mértéktenzora a c, φ polárkoordinátákban

$$\bar{g}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & c^2 \end{bmatrix},$$

amit könnyen átttranszformálhatunk a h, φ koordinátákba:

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} \left(\frac{dc}{dh}\right)^2 & 0 \\ 0 & c^2 \end{bmatrix}; \quad g^{ij} = \begin{bmatrix} \left(\frac{dh}{dc}\right)^2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{c^2} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

A virtuális képfelület mértéktenzorának meghatározásánál induljunk ki a 4. ábrából ismert mértéktenzorú r, φ, z hengerkoordinátákból. A virtuális kép forgásfelület, normálisvektorának tehát sehol nem lesz φ irányú összetevője — $n_2/n_3=0$. Tekintettel arra, hogy a hengerkoordináták $r-z$ metszete ortonormált, a normálisvektor másik két komponensének aránya így írható:

$$\frac{n_1}{n_3} = -\frac{dz}{dr} = -\frac{dz}{dh} \frac{dh}{dr} = a \frac{d^2c}{dh^2} \frac{dh}{dr}.$$

A lokális beágyazás módszerével, (3.4), (3.7), illetve az r, φ, z rendszer $\bar{g}_{\alpha\beta}$ mértéktenzorának felhasználásával nyerjük a virtuális képfelület r, φ -re vonatkozó mértéktenzorát:

$$\bar{g}_{ij} = \begin{bmatrix} 1 + a^2 \left(\frac{d^2c}{dh^2} \frac{dh}{dr}\right)^2 & 0 \\ 0 & r^2 \end{bmatrix}.$$

Ezt a h, φ rendszerbe transzformálva

$$\tilde{g}_{ij} = \dots = \begin{bmatrix} \left(\frac{dc}{dh} + h \frac{d^2c}{dh^2}\right)^2 + a^2 \left(\frac{d^2c}{dh^2}\right)^2 & 0 \\ 0 & h^2 \left(\frac{dc}{dh}\right)^2 \end{bmatrix}.$$

A virtuális kép most nyert mértéktenzorából és a valódi kép (5) mértéktenzorából a torzulástenzort a szokásos módon képezzük:

$$\gamma_k^i = g^{ij} \tilde{g}_{jk} = \begin{bmatrix} \left(1 + h \frac{dh}{dc} \frac{d^2c}{dh^2}\right)^2 + \left(a \frac{dh}{dc} \frac{d^2c}{dh^2}\right)^2 & 0 \\ 0 & \left(\frac{h}{c} \frac{dc}{dh}\right)^2 \end{bmatrix}.$$

A megoldás utolsó lépéseként a $c=c(h)$ függvényt kell meghatároznunk. Felhasználva az

$$n = \frac{\sin \alpha}{\sin \beta}$$

törési törvényt, a 10a ábra alapján írhatjuk:

$$c = h + b \operatorname{tg} \beta = \dots = h + \frac{b}{\sqrt{n^2 + \frac{n^2 a^2}{h^2} - 1}}.$$

Ennek az összefüggésnek és az előbb felírt torzulástenzornak az ismeretében a feladat már megoldottnak tekinthető.

7. feladat. Határozzuk meg az U_1 potenciálú végtelen síklap és az azt merőlegesen dőfő vezetőszál elektrosztatikus terét!

Ez a feladat egy kicsit elűt az eddig megoldott, tisztán geometriai vonatkozású példáktól, e helyen való felvetését mégis indokoltnak látjuk. Tekintettel arra, hogy a torzulástenzor segítségével elektrosztatikai problémák megoldására alkalmas módszerek alkothatók, szükségesnek tartottuk, hogy erre a lehetőségre legalább egy példa kapcsán rámutassunk.

A következőkben először azt az általános gondolatmenetet ismertetjük, melynek segítségével a torzulástenzor eszköze az elektrosztatikai vizsgálatokhoz alkalmazható. Megmutatjuk, hogy ez a gondolatmenet is elvezet a síkproblémák *konform leképezés* néven ismert megoldásmódjához, majd egy további feladatcsoportra, a *gömbproblémákra* vonatkozóan részletesen kifejtjük a módszert.

Elektrosztatikai vizsgálataink során is feltételezünk egy tárgyteret (x^i) és egy képteret (\tilde{x}^i), melyek pontjai a (2.1) összefüggéssel vannak egymáshoz rendelve:

$$x^i(P) = \tilde{x}^i(\tilde{P}). \quad (6)$$

A tárgyterbeli potenciálteret úgy képezzük le a képtérbe, hogy az egymáshoz megfelelő pontok potenciálját azonosnak vesszük:

$$U(x^i) = \tilde{U}(\tilde{x}^i). \quad (7)$$

Kérdés: a tárgy- és képtér milyen kapcsolata — vagyis milyen *torzulástenzor* — mellett igaz, hogy a tárgyterbeli tetszőleges, de $\Delta U = 0$ -t teljesítő potenciálfüggvény képtérbeli megfelelője is $\Delta \tilde{U} = 0$ -t teljesítő potenciálfüggvény? E feladatot (esetleg megszorításokkal) megoldva, olyan *megengedett* tárgy-képtér kapcsolatokat találhatunk, melyek tetszőleges (esetleg egyes kikötéseknek eleget tevő) potenciálfüggvényt ismét potenciálfüggvénybe képeznek le!

Vizsgáljuk tehát meg, milyen torzulás nem befolyásolja a $\Delta U = 0$ egyenlet érvényességét?

Most az egyszerűség kedvéért mind a tárgy-, mind a képtérben ortogonális rendszerre szorítkozunk:

$$g_{ij} = g_i^2 \delta_{ij} \quad (i\text{-re nem összegezve})$$

$$\tilde{g}_{ij} = \tilde{g}_i^2 \delta_{ij} \quad (i\text{-re nem összegezve}).$$

A torzulástenzor szintén ortogonális:

$$\gamma_j^i = g^{ik} \tilde{g}_{kj} = \left(\frac{\tilde{g}_i}{g_i} \right)^2 \delta_{ij} = \gamma_i^2 \delta_{ij} \quad (i\text{-re nem összegezve}). \quad (8)$$

A tárgyter potenciálfüggvényére a $\Delta U = 0$ feltételt a következő ismert formában írhatjuk:

$$\Delta U = \frac{1}{g_1 g_2 g_3} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{g_{k+1} g_{k+2}}{g_k} \frac{\partial U}{\partial x^k} = 0 \quad (\text{ahol } g_l = g_{l-3}, \text{ ha } l > 3). \quad (9)$$

A képtérben ugyanez a feltétel:

$$\Delta \tilde{U} = \frac{1}{\tilde{g}_1 \tilde{g}_2 \tilde{g}_3} \sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial \tilde{x}^k} \frac{\tilde{g}_{k+1} \tilde{g}_{k+2}}{\tilde{g}_k} \frac{\partial \tilde{U}}{\partial \tilde{x}^k} = 0,$$

ami (6), (7), (8) felhasználásával így is írható:

$$\sum_{k=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\gamma_{k+1} \gamma_{k+2}}{\gamma_k} \frac{g_{k+1} g_{k+2}}{g_k} \frac{\partial U}{\partial x^k} = 0. \quad (10)$$

Most olyan torzulástenzort szeretnénk találni, ami biztosítja, hogy ha (9) igaz, (10) is teljesül. Amíg $U(x^i)$ -re nem teszünk semmi kikötést, ez csak akkor állhat fenn, ha (9) és (10) három tagja páronként csak egy $K(x^i)$ szorzóban tér el egymástól. Ez a feltétel a két első tagra vonatkozóan így írható:

$$K(x^i) \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{g_2 g_3}{g_1} \frac{\partial U}{\partial x^1} = \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1} \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{g_2 g_3}{g_1} \frac{\partial U}{\partial x^1} + \frac{g_2 g_3}{g_1} \frac{\partial U}{\partial x^1} \cdot \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1}, \quad (11)$$

$$\left[K(x^i) - \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1} \right] \frac{\partial}{\partial x^1} \left[\frac{g_2 g_3}{g_1} \frac{\partial U}{\partial x^1} \right] = \left[\frac{g_2 g_3}{g_1} \frac{\partial U}{\partial x^1} \right] \cdot \frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1},$$

ami tetszőleges $U(x^i)$ mellett akkor teljesül, ha

$$K(x^i) = \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1}$$

és

$$\frac{\partial}{\partial x^1} \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1} = 0.$$

(9) és (10) még két további, (11)-hez hasonló feltételt szolgáltat; ezekből

$$\left. \begin{aligned} K &= \frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1} = \frac{\gamma_1 \gamma_3}{\gamma_2} = \frac{\gamma_1 \gamma_2}{\gamma_3} \Rightarrow \gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma \\ \frac{\partial \gamma}{\partial x^i} &= 0 \Rightarrow \gamma = \text{const} \end{aligned} \right\}. \quad (12)$$

Az egyetlen megengedett torzulástenzor tehát

$$\gamma_j^i = \gamma^2 \cdot \delta_{ij};$$

vagyis azt az ismert eredményt kaptuk, ami szerint az egymásba helyfüggetlen nagyítással, forgatással, tükrözéssel átmenő terek helyesen transzformálják a potenciálfüggvényt.

Hasznosabb eredményeket úgy nyerhetünk, ha $U(x^i)$ -re valami megkötést vezetünk be.

Legyen pl. a továbbiakban $\frac{\partial U}{\partial x^3} = 0$! Ezzel mind (9)-ben, mind (10)-ben zérus a harmadik tag; a (12) alatti követelményekből csak ennyi marad:

$$\frac{\gamma_2 \gamma_3}{\gamma_1} = \frac{\gamma_1 \gamma_3}{\gamma_2} \Rightarrow (\gamma_1)^2 = (\gamma_2)^2$$

$$\frac{\partial \gamma_3}{\partial x^1} = 0 \quad \frac{\partial \gamma_3}{\partial x^2} = 0.$$

Azok a leképezések, melyek torzulástenzora ilyen alakú

$$\gamma_j^i = \begin{bmatrix} f(x^i) & 0 & 0 \\ 0 & f(x^i) & 0 \\ 0 & 0 & g(x^3) \end{bmatrix} \quad (13)$$

teljesítik a fenti feltételeket, tehát a $\frac{\partial U}{\partial x^3} = 0$ sajátsággal rendelkező potenciálfüggvényeket ismét potenciálfüggvénné képezik le.

A (13) „megengedett” torzulástenzor segítségével először a konform leképezés módszeréhez szeretnénk eljutni. A teret az x_i kartéziusi koordinátákkal hálózzuk be, az egyes pontok leképezés utáni koordinátáit is ebben adjuk meg:

$$x_1(\tilde{P}) = f_1[x_1; x_2(P)]$$

$$x_2(\tilde{P}) = f_2[x_1; x_2(P)]$$

$$x_3(\tilde{P}) = x_3(P),$$

és a $\frac{\partial U}{\partial x_3} = 0$ kikötéssel síkproblémákra szorítkozunk. A koordináta-deriváltak:

$$\frac{\partial x_i(\tilde{P})}{\partial x_j(P)} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & 0 \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

A torzulástenzort az „illeszkedő felületek” három dimenzióban is alkalmazható módszerével és (3.12)-vel számoljuk:

$$\gamma_k^j = \frac{\partial x_p(\tilde{P})}{\partial x_j(P)} \frac{\partial x_p(\tilde{P})}{\partial x_k(P)} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)^2 & \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & 0 \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)^2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

γ_k^j akkor lesz (13) alakú megengedett torzulástenzor, ha a következő két feltétel teljesül:

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \frac{\partial f_1}{\partial x_2} + \frac{\partial f_2}{\partial x_1} \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = 0, \quad (14)$$

$$\left(\frac{\partial f_1}{\partial x_1} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_1} \right)^2 = \left(\frac{\partial f_1}{\partial x_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x_2} \right)^2. \quad (15)$$

(14) és (15)-ből algebrai átalakításokkal egyenértékű feltételeket nyerhetünk:

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_1} = \pm \frac{\partial f_2}{\partial x_2}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_2} = \mp \frac{\partial f_2}{\partial x_1}. \quad (17)$$

A kapott két összefüggés a fölülre írt előjelek esetén megegyezik az $x_1 + jx_2 - u_1 + ju_2$ [$u_i = f_i(x_1, x_2)$] komplex függvény Cauchy—Riemann differenciálhatósági feltételével; módszerünket a síkproblémákra alkalmazva tehát a differenciálható komplex függvényekkel végrehajtott konform leképezéssel egyező eredményre jutottunk. ((16) és (17) alsó előjelei azt mutatják, hogy a differenciálható komplex függvények által szolgáltatott leképezésen túlmenően a potenciáltér tükrözése is megengedett.)

Ezek után térjünk vissza eredeti feladatunkra: a végtelen sík és az azt merőlegesen dőő végtelen vezetősíal esetére.

Ha a dőféspontba rögzítjük egy r, φ, ϑ gömbkoordináta-rendszer origóját, teljesül a $\frac{\partial U}{\partial r} = 0$ feltétel (kivéve a dőféspont közvetlen környezetét—de ezt itt éppen úgy számításán kívül hagyhatjuk, mint a szélhatásokat a síkproblémáknál). A leképezés megvalósításához olyan teret kell keresnünk, melynek kapcsolatát a gömbkoordinátákkal (13) alakú torzulástenzor írja le. Ezt a z, φ, t hengerkoordinátákban találjuk meg (az egyes koordináták értelmezése a 11. ábrán látható). A z koordináta $z = \ln r$ léptéktranszformációja után a hengerkoordináták kontravariáns mértéktenzora:

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{t^2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Az r, φ, ϑ gömbkoordináták ϑ koordinátáján végezzünk egy (egyelőre függőben tartott) léptéktranszformációt:

$$\begin{aligned} r &= r \\ \varphi &= \varphi \\ \vartheta &= f(t) \end{aligned} \quad \frac{\partial \tilde{x}^i}{\partial \tilde{x}^j} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{d\vartheta}{dt} \end{bmatrix}.$$

Felhasználva az r, φ, ϑ gömbkoordináták 4. ábrán adott \tilde{g}_{pq} mértéktenzorát

$$\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{x}^p}{\partial \tilde{x}^i} \frac{\partial \tilde{x}^q}{\partial \tilde{x}^j} \tilde{g}_{pq} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 \sin^2 \vartheta & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 \end{bmatrix}.$$

A torzulástenzor

$$\gamma_k^i = g^{ij} \tilde{g}_{jk} = \begin{bmatrix} \frac{1}{r^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{r^2 \sin^2 \vartheta}{t^2} & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2 \end{bmatrix}$$

akkor lesz (13)-al egyező alakú, ha

$$\frac{r^2 \sin^2 \vartheta}{t^2} = r^2 \left(\frac{d\vartheta}{dt} \right)^2$$

$$\frac{\sin \vartheta}{t} = \frac{d\vartheta}{dt}.$$

E differenciálegyenlet megoldása $t = \tau \cdot \operatorname{tg} \vartheta/2$. Ezzel vezetve be ϑ -ban az új lép-téket, a (7) összefüggés a két tér között megengedett potenciálfüggvény transzfor-mációt ad. Az r, φ, t hengerkoordinátákban feladatunk síkproblémaként jelent-kezik, hiszen $\frac{\partial U}{\partial r} = 0$.

Legyen a gömbkoordinátákban az U_1 potenciálú sík

$$\varphi = \pm 90^\circ; \quad \text{míg} \quad 0 < r < \infty \\ 0 < \vartheta < 180^\circ.$$

Ez a hengerkoordinátákba való leképezés után a

$$\varphi = \pm 90^\circ; \quad -\infty < z < \infty \\ 0 < t < \infty$$

síkba megy át (11a—b ábrák).

A vezetősík, ami a gömbkoordinátákban merőlegesen dőli az U_1 síkot:

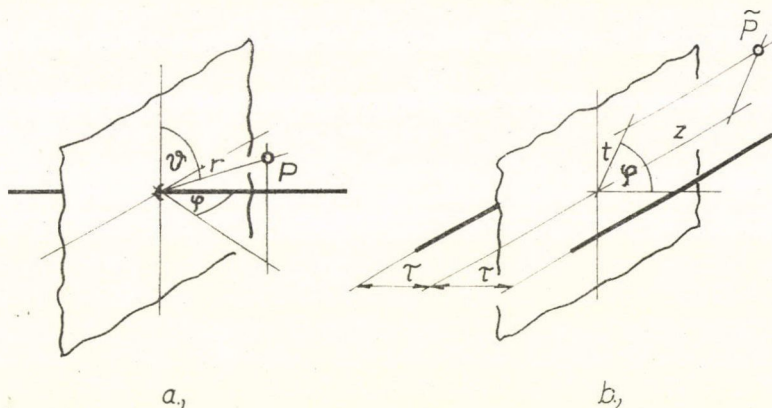
$$\varphi = 0^\circ, 180^\circ; \quad 0 < r < \infty \\ \vartheta = 90^\circ;$$

a leképezés után a hengerkoordinátákban

$$\varphi = 0^\circ, 180^\circ; \quad -\infty < z < \infty \\ t = \tau;$$

az U_1 potenciálú sík két oldalán, azzal párhuzamosan futó egyenesekbe megy át (11a—b ábrák). Utóbbi elrendezés potenciáltere ismert, tehát a φ, ϑ koordinátákban is felírható. A részletes számítások mellőzésével, a sík egyik oldalán levő féltérre vonatkozóan

$$U = U_1 + \text{const} \cdot \ln \frac{\text{ch} \ln \text{tg } \vartheta/2 + \cos \varphi}{\text{ch} \ln \text{tg } \vartheta/2 - \cos \varphi}. \quad (18)$$



11. ábra

A most bevezetett gömbkoordináta — hengerkoordináta leképezéssel sok más feladat is megoldható — pl. két, egymást nem merőlegesen keresztező egyenes vezető tere, közös csúcspontú kúpfelületek tere, stb.

Összefoglalásul megjegyezzük, hogy a differenciálgeometriában nagy szerepet játszó Riemann-geometria alapösszefüggéseit alkalmazva kézenfekvően adódott a torzulástenzor és a torzulási invariánsok fogalma. Ezeket a fogalmakat, valamint a velük kapcsolatos számítási eljárásokat alkalmazva kielégítően megoldható egymással valamilyen leképezési kapcsolatban álló geometriai objektumok (pl. képek) összehasonlítása, a leképezési folyamat értékelése.

Gyakorlati szempontból jelentős lehet pl. a képátviteli technikákban, különösen a televíziós technikában alkalmazott berendezések képtorzító hatásainak vizsgálata (pl. TV-képcső geometriai kialakításából eredő torzítások). Ugyanakkor a matematikai vizsgálatok alapjául szolgáló fogalmak és definíciók véleményünk szerint megfelelő kiindulópontjai lehetnek egyértelmű mérési eljárások kidolgozásának is.

Matematikai szempontból a magasabbrendű torzulásjellemzők bevezetése, az indefinit metrikájú terekben definiált torzulások értelmezése, nemkommutatív tenzoralkébrákra való kiterjesztés, valamint a Hilbert-térre való általánosítás jelentenén a továbblépés irányát. A módszer más területekre való kiterjesztésétől további érdekes eredményeket remélünk.

IRODALOM

- [1] IEC Publication 107. 1960.
- [2] *A. Duschek—A. Hochrainer*: Grundzüge der Tensorrechnung in analytischer Darstellung. I. Band. Springer Vrlg., Wien. 1960.
- [3] *Pach Zs. P.-né—Frey T.*: Vektor- és tenzoranalízis. Műszaki Könyvkiadó, Budapest. 1960.
- [4] *A. S. Petrow*: Einstein-Räume. Akademie-Vrlg., Berlin. 1964.
- [5] *P. K. Raschewski*: Riemannsche Geometrie und Tensoranalysis. Deutscher Vrlg. der Wissenschaften, Berlin. 1959.
- [6] *A. Duschek—W. Mayer*: Lehrbuch der Differentialgeometrie. II. Band: Riemannsche Geometrie. Teubner Vrlg., Leipzig. 1930.
- [7] *E. H. Linfoot*: Qualitätsbewertung optischer Bilder. F. Vieweg & Sohn, Braunschweig. 1960.
- [8] *V. B. Kelman—Sz. Ja. Javor*: Elektronoptika. Akadémiai Kiadó, Budapest. 1965.
- [9] *Hazay I.*: Földi vetületek. Akadémiai Kiadó, Budapest. 1954.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMELMÉLETI KINEMATIKA ÉS MECHANIKA SZEMLÉLETES TARTALMÁRÓL*

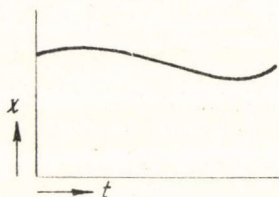
W. HEISENBERG

E dolgozatban mindenek előtt megadjuk a hely, sebesség, energia stb. szavak egzakt definícióját, mely megőrzi érvényességét a kvantummechanikában, pl. az elektronra alkalmazva is. Megmutatjuk, hogy kanonikusan konjugált mennyiségek egyidejűleg csak bizonyos jellegzetes pontatlansággal határozhatók meg (1. §). Ez a pontatlanság voltaképpen az oka a statisztikus összefüggések fellejtésének a kvantummechanikában. Matematikai megfogalmazását a Dirac—Jordan-elmélet segítségével sikerült megadni (2. §). Az így nyert alapelvekből kiindulva megmutatjuk, miképpen érthetők meg a makroszkópikus folyamatok a kvantummechanika alapján (3. §). Az elmélet megvilágítására néhány speciális gondolatkísérletet tárgyalunk (4. §).

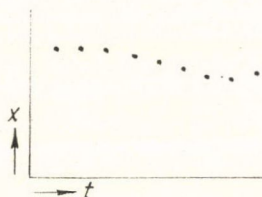
Azt, hogy egy fizikai elmélet szemléletes tartalmát megértettük, akkor gondoljuk, ha ezen elmélet kísérleti következményeit minden egyszerű esetben kvalitatíve el tudjuk gondolni, és ha ugyanakkor azt is felismertük, hogy az elmélet alkalmazása során sohasem bukkan fel belső ellentmondás. Így pl. azt, hogy a zárt háromdimenziós térre vonatkozó Einstein-féle elképzelést szemléletesen megértettük, azért gondoljuk, mert ezen elképzelés kísérleti következményeit ellentmondásmentesen el tudjuk gondolni. Természetesen ezek a következmények ellentmondanak a térről és az időről alkotott, megszokott szemléletes fogalmainknak. Meggyőződhetünk azonban arról, hogy e megszokott téridő-fogalmak alkalmazhatósága igen nagy terekre nem következik sem gondolkodásunk törvényeiből, sem a tapasztalatból. A kvantummechanika szemléletes értelmezése mindeddig tele van belső ellentmondással, melyek a nézeteknek a diszkontinuum- és kontinuumelmélet, a korpuszkulák és a hullámok körül folyó harcán keresztül nyilvánulnak meg. Már ennek alapján kézenfekvő a következtetés, hogy a kvantummechanika értelmezése a megszokott kinematikai és mechanikai fogalmak segítségével semmi esetre sem lehetséges. A kvantummechanika éppen abból a kívánságból született meg, hogy e megszokott kinematikai fogalmakkal szakítsunk és azok helyére konkrét, kísérletileg adott számok között megállapított összefüggéseket állítsunk. Minthogy ez láthatóan sikerült, másrésről aligha lesz szükség a kvantummechanika matematikai vázának felülvizsgálatára. Éppígy nem lesz szükség a téridő-geometria felülvizsgálatára sem kicsiny térrészek és időtartamok esetén, minthogy elég nagy tömegek választásával elérhetjük, hogy a kvantummechanikai törvények a klasszikus törvényeket tesztölgesen megközelítsék, ha még oly kicsiny térrészekkel és időtartamokkal van is dolgunk. Az azonban, hogy a kinematikai és mechanikai fogalmakat szükséges revideálnunk, úgy látszik, közvetlen következménye a kvantummechanika alap-

* ZS. f. Phys. 43, 172, 1927.

egyenleteinek. Ha adott valamely m tömeg, megszokott szemléletünkben egyszerűen érthető jelentése van, ha ezen m tömeg, súlypontjának helyéről vagy sebességéről beszélünk. A kvantummechanikában a tömeg, a hely és a sebesség között azonban fenn kell állnia a $pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$ összefüggésnek. Alapos okunk van tehát arra, hogy gyanút fogjunk, a „hely” és „sebesség” szavak nem alkalmazhatók kritikátlanul.



1. ábra



2. ábra

Ha ehhez még hozzátesszük, hogy az igen kis térrészekben és időtartamok alatt végbemenő folyamatokra valamiféleképpen diszkontinuitások jellemzők, úgy ép-penséggel a „hely” és „sebesség” fogalmak alkalmazhatóságának korlátozott volta egyenesen közvetlenül hihetővé válik. Ha pl. valamely tömegpont egydimenziós mozgását gondoljuk el, úgy ha kontinuumelmélet keretei között dolgozunk, meg-rajzolhatjuk a részecske (pontosabban: a tömegközéppont) pályájának megfelelő $x(t)$ görbét (1. ábra), melynek érintője megadja a mindenkor sebességet. Diszkontinuum-elméletben ezzel szemben e görbe helyére egymástól véges távolságra elhelyezkedő pontok sorozata lép (2. ábra). Ebben az esetben nyilvánvalóan nincs értelme sebességről beszélni valamely meghatározott helyen, hiszen a sebesség csupán két hely segítségével definiálható és mert — ebből következően — minden egyes ponthoz két-két különböző sebesség tartozik.

Felmerül tehát a kérdés: Vajon e kinematikai és mechanikai fogalmak pontosabb elemzésével nem lehet-e tisztázni a kvantummechanika szemléletes értelmezésében mindaddig fennálló ellentmondásokat, és eljutni a kvantummechanikai összefüggések szemléletes megértéséhez? [1].

1. §. *A hely, a pálya, a sebesség és az energia fogalma.* Ahhoz, hogy valamely objektum kvantummechanikai viselkedését nyomunkkövethessük, ismernünk kell ezen objektum tömegét, továbbá az erőket, mely a különféle terektől és más objektumoktól erednek. Csak ekkor írható fel a kvantummechanikai rendszer Hamilton-függvénye. (Az alább következő megfontolások általában a nem-relativisztikus kvantummechanikára vonatkoznak, minthogy a kvantumelméleti elektrodinamika törvényeit illető ismereteink még igen kevésbé teljesek [2].) Az objektum „alakjára” vonatkozóan szükségtelen bármiféle további kijelentést tenni; legcélszerűbben az említett kölcsönhatási erők összessége jelölhető meg az alak szóval.

Ha tisztázni akarjuk, hogy miként értendő a kifejezés: „az objektum helye”, pl. az elektroné (adott vonatkoztatási rendszerhez viszonyítva), úgy meghatározott kísérleteket kell megadnunk, melyek segítségével elgondolásunk szerint „az elektron helye” megmérhető; másként nincs értelme ennek a kifejezésnek. Olyan kísérletekben, amelyek elvben lehetővé teszik, hogy „az elektron helyét” akár tet-

szöveges pontossággal is meghatározzuk, nincs hiány. Pl. világítsuk meg az elektront és szemléljük mikroszkóppal. A helymérés elérhető legnagyobb fokú pontosságát itt lényegében a felhasznált fény hullámhossza határozza meg. Elvben alkalmasint gamma-sugár-mikroszkópot fogunk alkalmazni; ennek segítségével a helymeghatározás oly pontosan végezhető el, ahogyan csak akarjuk. Egy mellékkörülmeny azonban lényeges e mérésnél: a Compton-effektus. Az elektronnól érkező szórt fény minden fajta megfigyelése fényelektromos effektust feltételez (a szemben, a fényképező lemezen, a fotocellában); mondhatjuk tehát: egy fénykvantum az elektronnak ütközik, azon visszaverődik vagy elhajlást szenved, és azután a mikroszkóp lencsái által még egyszer eltérítve kiváltja a fotoeffektust. A helymeghatározás pillanatában, vagyis abban a pillanatban, amikor a fénykvantum az elektronnal elhajlást szenved, az elektron diszkontinuus módon változtatja meg impulzusát. Ez a megváltozás annál nagyobb, minél kisebb a használt fény hullámhossza, azaz minél pontosabb a helymeghatározás. Abban a pillanatban tehát, amelyben az elektron helye ismert, impulzusa ennél fogva csak ezen diszkontinuus változásnak megfelelő mennyiségek erejéig lehet ismeretes. Minél pontosabban határoztuk meg tehát a helyet, annál pontatlanabban ismert az impulzus és megfordítva; ebben

a $p_q - q_p = \frac{h}{2\pi i}$ összefüggés közvetlen szemléletes értelmezését ismerhetjük fel.

Legyen q_1 a pontosság, mellyel q értéket ismerjük (q_1 mondjuk q közepes hibája), azaz esetünkben a használt fény hullámhossza, p_1 pedig a pontosság, mellyel p értéke meghatározható, úgy a Compton-effektus elemi képletei szerint p_1 és q_1 között a

$$p_1 q_1 \sim h \quad (1)$$

kapcsolat áll fenn.

Azt, hogy az (1) összefüggés a $p_q - q_p = \frac{h}{2\pi i}$ felcserélési összefüggéssel közvetlen matematikai kapcsolatban áll, később fogjuk megmutatni. Hadd mutassunk rá itt arra, hogy az (1) egyenlet precíz kifejezését szolgáltatja ama tényeknek, amelyek leírását korábban a fázisér h nagyságú cellákra való felosztása segítségével kísérelték meg.

Az elektron helyének meghatározása céljából más eljárásokhoz, pl. ütközési-kísérletekhez is folyamodhatunk. Pontos helymérés igen gyors részecskéekkel való ütközéseket igényel, minthogy lassú elektronok esetében az elhajlási jelenségek, melyek *Einstein* szerint a de Broglie-hullámok létezésének folyamányaként jelentkeznek (lásd pl. Ramsauer-effektus), a hely pontos meghatározását megakadályozzák. Pontos helymérés esetén az elektron impulzusa ismét diszkontinuus változást szenved tehát, és a pontosságra vonatkozó egyszerű becslés a de Broglie-hullámokra vonatkozó képletek segítségével ismét az (1) összefüggést adja.

Ezen megfontolás alapján „az elektron helyének” fogalma eléggé világosan meghatározottnak látszik; szóljunk még röviden az elektron „kiterjedéséről”. Ha két igen gyors részecske egymást Δt idővel követően az elektronnak ütközik, úgy az elektronnak e két részecske által definiált helyzetei egymáshoz igen közel esnek; távolságukat jelölje Δl . Az alfa-sugarak esetében megfigyelt törvényszerűségekből azt a következtetést vonjuk le, hogy Δl nagyságrendben 10^{-12} cm-ig leszorítható, hacsak Δt -t elég kicsinek és a részecskéket elég gyorsnak választjuk. Ez az értelme annak, ha azt mondjuk, hogy az elektron olyan részecske, amelynek sugara nem nagyobb 10^{-12} cm-nél.

Térjünk át most az „elektronpálya” fogalmára. Pályán a tér pontjainak egy sorozatát értjük (adott vonatkoztatási rendszerben), mely pontokkal az elektron „helye” egymást rendre követő időpontokban egybeesik. Miután azt már tudjuk, mit kell „adott időponthoz tartozó helyen” értenünk, itt nem lépnek fel új nehézségek. Mindazonáltal könnyen belátható, hogy pl. e gyakran használt kifejezésnek: „az elektron 1S pályája a hidrogén atomban”, a mi nézőpontunkból tekintve nincs értelme. Ahhoz ugyanis, hogy ezt az 1S „pályát” kimérjük, az atomot olyan fényvel kellene megvilágítanunk, amelynek hullámhossza mindenesetre lényegesen kisebb mint 10^{-8} cm. Az ilyen fényből azonban egyetlenegy fénykvantum elegendő ahhoz, hogy az elektront teljesen kivesse „pályájáról” (minek folytán az ilyen pályának mindig csak egyetlen pontja definiálható), a „pálya” szónak itt tehát nincs értelmes jelentése. Erre az új elméletek ismerete nélkül is, egyszerűen már a kísérleti lehetőségek alapján következtethetünk.

Ezzel szemben a mondott helymérés elvégezhető sok, 1S állapotban levő atomon. (Adott „stacionárius” állapotban levő atomok pl. elvben a Stern—Gerlach-kísérlet segítségével különíthetők el.) Az atom valamely meghatározott állapota, pl. az 1S állapot esetében léteznie kell tehát az elektron helyéhez rendelt valószínűség-függvénynek, mely a klasszikus pálya összes fázisokra kiterjedően képezett középértékének felel meg és amely mérések segítségével tetszés szerinti pontossággal meghatározható. Born szerint [3] ezt a függvényt $\psi_{1S}(q)\bar{\psi}_{1S}(q)$ adja meg, ahol $\psi_{1S}(q)$ az 1S állapothoz tartozó Schrödinger-féle hullámfüggvény. Csatlakozva Dirac [3] és Jordan [3] megfogalmazásához, a későbbi alkalmazások kedvéért ezt szívesebben fejezem ki a következőképpen: A valószínűséget $S(1S, q)\bar{S}(1S, q)$ adja meg, ahol $S(1S, q)$ az E -t q -val összekötő $S(E, q)$ transzformációs mátrix $E=E_{1S}$ -hez tartozó oszlopát jelenti (E =energia).

Abban, hogy a kvantumelméletben adott (pl. az 1S) állapothoz csak az elektron helyének valószínűség-függvénye adható meg, Born és Jordan nyomán a kvantumelmélet egy jellegzetesen statisztikus vonását ismerhetjük fel, mely az előbbi a klasszikus elmélettől megkülönbözteti. Mondhatjuk azonban, ha akarjuk, Dirac-kal együtt, hogy a statisztikák kísérleteink hozzák be. Hiszen nyilvánvaló, hogy az elektron adott helyének a klasszikus elméletben is csak a valószínűsége adható meg, míg az atom fázisai nem ismertek. A különbség a klasszikus, valamint a kvantummechanika között inkább a következőkben áll: Klasszikusan mindenkor úgy gondolhatjuk, hogy előzőleg elvégzett kísérletekkel a fázist meghatároztuk. A valóságban azonban ez lehetetlen, minthogy minden, a fázis meghatározására szolgáló kísérlet az atom szétbontását, ill. megváltozását eredményezi. Az atom valamely stacionárius „állapotában” a fázisok elvileg meghatározatlanok, ami az ismert

$$Et - tE = \frac{h}{2\pi i} \quad \text{vagy} \quad Jw - wJ = \frac{h}{2\pi i}$$

egyenletek szemléltetésének tekinthető (J =hatásváltozó, w =szögváltozó).

A „sebesség” szó értelmét adott objektum esetében könnyű mérés segítségével definiálni, ha erőmentes mozgásról van szó. Az objektumot megvilágíthatjuk pl. vörös fényvel, és a szórt fény Doppler-effektusa segítségével megállapíthatjuk a részecske sebességét. A sebesség meghatározása annál pontosabb lesz, minél nagyobb a felhasznált fény hullámhossza, minthogy ekkor annál kisebb lesz a részecske egy fénykvantumra eső, Compton-effektus okozta sebességváltozása. A helymeg-

határozás ennek megfelelően pontatlan lesz, amint az az (1) egyenletnek megfelel. Ha valamely atomi elektron sebességét kívánjuk adott pillanatban megmérni, úgy alkalmasint e pillanatban a magtöltést és a többi elektrontól származó erőket hirtelen „el fogjuk tüntetni”, úgyhogy a mozgás ettől fogva erőmentes legyen, és ez után a sebesség meghatározását a fent megadott módon végezzük el. Ismét könnyen meggyőződhetünk arról, a fentiekhez hasonlóan, hogy az atom valamely adott állapota, pl. az $1S$ állapot esetében nem definiálható a $p(t)$ függvény. Ismét létezik azonban p ezen állapothoz tartozó valószínűség-függvénye, melynek kifejezése Dirac és Jordan szerint $S(1S, p)\bar{S}(1S, p)$. Itt $S(1S, p)$ ismét az E -t p -vel összekötő $S(E, p)$ transzformációs mátrix azon oszlopát jelenti, mely $E = E_{1S}$ -hez tartozik.

Végezetül hadd utaljunk azokra a kísérletekre, amelyek lehetővé teszik az energia vagy a J hatásváltozó értékeinek mérését; az ilyen kísérletek különösen fontosak, minthogy csak ezek segítségével definiálható, mire gondolunk, amikor az energia és J diszkontinuus változásáról beszélünk. A Franck—Hertz-féle ütközési kísérletek lehetővé teszik, hogy az atomok energiájának mérését az energiatételnek a kvantumelméletben is fennálló érvénye folytán egyenes vonalú mozgást végző elektronok energiamérésére vezessük vissza. Ez a mérés elvben tetszőleges pontossággal elvégezhető, hacsak az elektron helyének, azaz a fázisnak egyidejű méréséről lemondunk (vö. fent p meghatározásával) az $E t - t E = \frac{h}{2\pi i}$ összefüggésnek megfelelően.

A Stern—Gerlach-kísérlet az atom mágneses vagy közepes elektromos momentumának meghatározását teszi lehetővé, azaz olyan mennyiségek mérését, amelyek egyedül a J hatásváltozóktól függenek. A fázisok elvileg meghatározatlanok maradnak. Ahogy nincs értelme valamely fényhullám frekvenciájáról beszélni adott pillanatban, ugyanúgy nem beszélhetünk az atom energiájáról adott időpontban. A Stern—Gerlach-kísérletben ennek az a körülmény felel meg, hogy az energiamérés pontossága annál kisebb lesz, minél rövidebb az az időtartam, amelynek folyamán az atomok az eltérítő erő hatásának vannak kitéve [4]. Az eltérítő erő felső határát ui. az adja meg, hogy ezen eltérítő erő potenciális energiája a sugárnyalábban belül csupán a stacionárius állapotok energiakülönbségeinél lényegesen kisebb értékkel változhat, amennyiben azt kívánjuk, hogy a stacionárius állapotok energiáit meg lehessen határozni. Legyen E_1 valamely energiaérték, mely ennek a feltételnek megfelel (E_1 egyben az energiamérés pontosságát is megadja), ekkor E_1/d az eltérítő erő legnagyobb értéke, ahol a d sugárnyaláb szélességét jelenti (d a használt diafragma szélességén mérhető le). Az atomsugár eltérítésének szöge ekkor

$\frac{E_1 t_1}{dp}$, ahol t_1 azt az időtartamot jelenti, amelynek folyamán az atomok az eltérítő erő hatása alatt állnak, p az atomok impulzusa a sugár irányában. Ennek az eltérítésnek legalább is olyan nagyságrendűnek kell lennie, mint a sugárnak a diafragmán fellépő elhajlás okozta, természetesen kiszélesedése; másként a mérés nem lehetséges. Az elhajlás előidézte eltérítés szöge λ/d , ahol λ a de Broglie-féle hullámhosszat jelöli; tehát $\frac{\lambda}{d} \sim \frac{E_1 t_1}{dp}$, vagy miután $\lambda = \frac{h}{p}$, azért

$$E_1 t_1 \sim h. \quad (2)$$

Ez az egyenlet (1)-nek felel meg és azt mutatja, hogy pontos energiamérés csak az idő megfelelő pontatlansága árán lehetséges.

2. §. *A Dirac—Jordan-féle elmélet.* Az előző szakasz eredményeit a következő alakban lehet összefoglalni és általánosítani: *Mindazok a fogalmak, amelyek a klasszikus elméletben valamely mechanikai rendszer leírása céljából felhasználásra kerülnek, az atomi folyamatokra vonatkozóan is egzaktul definiálhatók, analógiában a klasszikus fogalmakkal.* A kísérletek azonban, melyek e definíció céljára szolgálnak, tisztán tapasztalataink szerint határozatlanságot foglalnak magukban, ha azoktól két kanonikusan konjugált mennyiség egyidejű meghatározását kívánjuk. E határozatlanság fokát az (1) összefüggés adja meg (mely tetszőleges kanonikusan konjugált mennyiségekre kiterjeszthető). Kézenfekvő ezen a ponton a kvantumelméletet a speciális relativitáselmélettel összehasonlítani. A relativitáselmélet szerint az „egyidejűség” szó értelme csakis kísérletek segítségével definiálható, melyekben a fény terjedési sebessége lényeges szerepet tölt be. Ha az egyidejűségnek „élesebb” definíciót lehetne adni, vagyis pl. léteznének végtelen gyorsan tovaterjedő jelek, úgy a relativitáselmélet lehetetlenné válnék. Minthogy azonban ilyen jelek nincsenek, minthogy — éppen ellenkezőleg — a fénysebesség már az egyidejűség definíciójában is fellép, nyílik tér a fénysebesség *állandóságának* posztulátuma számára; éppen ennek folytán nem áll ellentmondásban ez a posztulátum a „hely, sebesség, idő” szavak értelmű használatával. Hasonlóképpen áll a dolog az olyan fogalmak definíciójával, amilyenek „az elektron helye, sebessége” a kvantumelméletben. Minden kísérlet, mely e szavak értelmének definiálására felhasználható, szükségképpen tartalmazza az (1) egyenlettel adott pontatlanságot, még ha azok egyenként lehetővé teszik is p , ill. q fogalmának egzakt definícióját. Ha léteznének olyan kísérletek, melyek egyidejűleg lehetővé tennék p -nek és q -nak az (1) egyenlettel megszabottnál „élesebb” meghatározását, úgy a kvantummechanika lehetetlenné válnék. Ez a pontatlanság, melyet az (1) egyenlet határoz meg, nyit teret az olyan összefüggések számára, melyek a

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$$

kvantummechanikai csererelációban nyernek pregnáns kifejezést; ez teszi lehetővé a cserereláció fennállását, anélkül, hogy a p és q mennyiségek fizikai értelmét meg kellene változtatni.

Azon fizikai jelenségek esetében, amelyek kvantumelméleti megfogalmazása még nem ismeretes (ilyen pl. az elektrodinamika), az (1) egyenlet szolgáltatja követelmény hasznos lehet az új törvények felkutatásához. A kvantummechanika esetében az (1) egyenlet csekély mértékű általánosítással levezethető a Dirac—Jordan-féle megfogalmazásból. Ha valamely paraméter meghatározott η értéke mellett az elektron q koordinátájára q_1 pontossággal a q' értéket nyerjük, úgy e tény olyan $S(\eta, q)$ valószínűségi amplitúdó segítségével juttatható kifejezésre, amely a q' érték körül csupán egy hozzávetőlegesen q_1 kiterjedésű tartományban különbözik számottevően zérustól. Speciálisan írható pl.

$$S(\eta, q) \text{ arányos } e^{-\frac{(q-q')^2}{2q_1^2} - \frac{2\pi i}{h} p'(q-q')} \text{-vel,} \quad (3a)$$

tehát

$$S \bar{S} \text{ arányos } e^{-\frac{(q-q')^2}{q_1^2}} \text{-nel.} \quad (3b)$$

A p -hez tartozó valószínűségi amplitúdó ekkor

$$S(\eta, p) = \int S(\eta, q) S(q, p) dq. \quad (4)$$

Jordan nyomán írhatjuk:

$$S(q, p) = e^{\frac{2\pi i p q}{h}}. \quad (5)$$

Ekkor (4) szerint $S(\eta, p)$ csak azon p értékekre fog számottevően zérustól különbözni, amelyekre $\frac{2\pi(p-p')q_1}{h}$ nem sokkal nagyobb mint 1. Speciálisan a (3) esetben

$$S(\eta, p) \text{ arányos } \int e^{\frac{2\pi i(p-p')q}{h} - \frac{(q'-q)^2}{2q_1^2}} dq\text{-val,}$$

azaz

$$S(\eta, p) \text{ arányos } e^{-\frac{(p-p')^2}{2p_1^2} + \frac{2\pi i}{h} q'(p-p')} \text{-vel,}$$

tehát

$$S\bar{S} \text{ arányos } e^{-\frac{(p-p')^2}{p_1^2}} \text{-nel,}$$

ahol

$$p_1 q_1 = \frac{h}{2\pi}. \quad (6)$$

Az $S(\eta, q)$ alakjára vonatkozó (3) feltevés tehát azon kísérleti ténynek felel meg, hogy p -re a mérés a p' , q -ra a q' értéket adta [a pontosság (6)-tal megadott korlátozás mellett].

Tisztán matematikailag a kvantummechanika Dirac—Jordan-féle megfogalmazására jellemző, hogy a \mathbf{p} , \mathbf{q} , \mathbf{E} stb. mennyiségekre érvényes összefüggések igen általános mátrixokra érvényes egyenletek alakjában írhatók fel; valamely adott kvantummechanikai mennyiség ilyenkor átlós mátrix alakját öltve jelenik meg. Ezen írásmód lehetősége nyomban nyilvánvalóvá válik, ha a mátrixokat szemléletesen mint tenzorokat (vö. pl. tehetetlenségi nyomaték) fogjuk fel többdimenziós terekben, melyek között matematikai összefüggések állnak fenn. A koordinátarendszernek, melyben e matematikai összefüggéseket kifejezzük, a tengelyei mindenkor e tenzorok valamelyikének főtengetelyeivel hozhatók fedésbe. Végül két tenzor, A és B , matematikai kapcsolata mindenkor jellemezhető azon transzformációs képletekkel is, amelyek az A főtengetelyeinek megfelelő koordinátarendszert egy másik, a B főtengetelyeinek megfelelően irányított koordinátarendszerbe viszik át. Az utóbbi megfogalmazás felel meg a Schrödinger-féle elméletnek. A kvantummechanika igazán „invariáns”, minden fajta koordinátarendszertől független megfogalmazásának ezzel szemben nyilván a q -számok Dirac-féle írásmódját fogjuk tekinteni. Ha e matematikai skémából fizikai eredményeket akarunk levezetni, úgy a kvantumelméleti mennyiségekhez, azaz a mátrixokhoz (vagy többdimenziós térbeli tenzorokhoz) számokat kell rendelnünk. Ezt úgy kell értenünk, hogy a mondott többdimenziós térben megadunk valamilyen meghatározott irányt (ezt a végzett kísérlet jellege rögzíti), és feltesszük a kérdést: mi a mátrix „értéke” (a felhoyzott példában: a tehetetlenségi nyomaték értéke) e megadott irányban? A kérdésnek csak akkor van egyértelműen meghatározott értelme, ha a megadott irány az említett mátrix főtengetelyeinek valamelyikével egybeesik. De még ha az adott irány

kevessel el is tér a mátrix valamelyik főtengelyétől, akkor is beszélhetünk — bizonyos, e két irány egymáshoz képest mutatott eltérése által adott pontatlansággal, bizonyos valószínű hibával — a mátrixnak a megadott irányhoz tartozó „értékről”. Mondhatjuk tehát: Minden kvantummechanikai mennyiséghez vagy mátrixhoz hozzárendelhető valamely szám, mely megadja annak értékét bizonyos meghatározott valószínű hibával; a valószínű hiba függ a koordinátarendszertől; minden egyes kvantummechanikai rendszerhez tartozik egy-egy olyan koordinátarendszer, melyben e mennyiség valószínű hibája eltűnik. Valamely adott kísérlet tehát sohasem adhat pontos felvilágosítást az összes kvantummechanikai mennyiségről; az helyett a fizikai mennyiségeket — a kísérletre jellemző módon — „ismert” és „ismeretlen” (vagy: többé, ill. kevésbé pontosan ismert) mennyiségekre osztja fel. Valamely kísérlet eredményéből egy másik kísérlet eredménye csak akkor származtatható le egzaktul, ha a két kísérlet a fizikai mennyiségeket azonos módon osztja fel „ismert” és „ismeretlen” mennyiségekre (azaz: ha a tenzorokat a fent szemléltetésre már többször felhasznált többdimenziós térben mind a két kísérlet esetében ugyanazon irányból „szemléljük”). Ha két kísérlet különböző felosztást eredményez „ismert” és „ismeretlen” mennyiségekre, úgy ezen kísérletek eredményei között csak statisztikusan érvényes összefüggést lehetséges megadni.

E statisztikus összefüggés pontosabb megtárgyalása céljából vegyünk szemügyre egy gondolatkísérletet. Bocsássunk egy Stern—Gerlach-féle atomnyalábot először valamely F_1 téren át, amely oly erősen inhomogén a nyaláb irányában, hogy „rázóhatása” jelentékeny számú átmenetet idéz elő. Ez után az atomnyaláb haladjon egy ideig szabadon, F_1 -től meghatározott távolságra azonban kezdődjék egy újabb F_2 tér, mely F_1 -hez hasonlóan inhomogén. Az F_1 és F_2 terek között és az F_2 tér után legyen meg a lehetőség arra, hogy a különböző stacionárius állapotokban tartózkodó atomok számát pl. mágneses tér alkalmazásával megmérjük. Az atomra ható sugárzási reakcióerőket zérussal tesszük egyenlővé. Ha tudjuk, hogy az atom, mielőtt F_1 -en áthaladt volna, az E_n energiájú állapotban volt, úgy ezt a kísérleti tényt azáltal juttathatjuk kifejezésre, hogy az atomhoz — pl. a p -térben — meghatározott E_n energiájú és meghatározatlan β_n fázisú hullámfüggvényt rendelünk:

$$S(E_n, p) = \psi(E_n, p) e^{-\frac{2\pi i E_n(\alpha + \beta_n)}{h}}.$$

Miután az atom az F_1 téren áthaladt, ezen függvény helyett az

$$S(E_n, p) \xrightarrow{F_1} \sum_m c_{nm} \psi(E_m, p) e^{-\frac{2\pi i E_m(\alpha + \beta_m)}{h}} \quad (7)$$

megváltozott kifejezés lesz érvényben [5]. Itt a β_m -ek legyenek valamiképp önkényesen rögzítve, úgyhogy a c_{nm} együtthatókat az F_1 tér egyértelműen meghatározza. A c_{nm} mátrix transzformálja az F_1 téren való áthaladás előtti energiaértékeket az az F_1 -en való áthaladás utániakba. Ha F_1 után elvégezzük a stacionárius állapotok meghatározását pl. inhomogén mágneses tér segítségével, úgy $c_{nm} \bar{c}_{nm}$ valószínűséggel azt találjuk, hogy az atom az n állapotból az m állapotba ment át. Ha a kísérlet segítségével megállapítjuk, hogy az atom ténylegesen éppen az m állapotba ment át, úgy a továbbiak kiszámítása céljából az atomhoz nem a $\sum_m c_{nm} S_m$ függvényt, hanem a (mondott m -nek megfelelő) meghatározatlan fázisú S_m függvényt kell

hozzárendelnünk; kísérletileg tett megállapításunkkal, mely szerint „az atom az m állapotban van”, a különböző (c_{nm}) lehetőségek sokaságából kiválasztunk egy meghatározottat, az m -ediket, egyidejűleg „elrontunk” azonban mindent, amit a c_{nm} mennyiségek fázisviszonyaik révén még magukban foglaltak. Az atomsugár F_2 -n való áthaladása során ugyanaz ismétlődik meg, ami F_1 esetében történt. Legyen d_{nm} azon transzformációs mátrix koeficienseinek jele, amely az F_2 előtti energiákat az F_2 utániakba transzformálja. Ha F_1 és F_2 között nem végezzük el a stacionárius állapotok meghatározását, úgy a sajátfüggvény a következő szkéma szerint változik meg:

$$S(E_n, p) \xrightarrow{F_1} \sum_m c_{nm} S(E_m, p) \xrightarrow{F_2} \sum_m \sum_l c_{nm} d_{ml} S(E_l, p). \quad (8)$$

Legyen $\sum_m c_{nm} d_{ml} = e_{nl}$. Ha F_2 után megállapítjuk: mely stacionárius állapotban van az atom, úgy az l -edik állapot $e_{nl} \bar{e}_{nl}$ valószínűséggel adódik. Ha ezzel szemben F_1 és F_2 között megállapítottuk, hogy „az atom az m -edik állapotban van”, úgy F_2 után az l -edik állapot valószínűségét $d_{ml} \bar{d}_{ml}$ adja meg. Az egész kísérlet többszöri megismétlése esetén tehát (miközben F_1 és F_2 között minden esetben meg kell törtennie az állapot meghatározásának) F_2 után az l -edik állapotot a $Z_{nl} = \sum_m c_{nm} \bar{c}_{nm} d_{ml} \bar{d}_{ml}$

relatív gyakorisággal fogjuk észlelni. Ez a kifejezés nem egyezik meg $e_{nl} \bar{e}_{nl}$ -l. Jordan (1. c.) ez okból beszélt „a valószínűségek interferenciájáról”. Ehhez a szóhasználathoz azonban nem szeretnék csatlakozni. A két kísérlet ugyanis, mely az $e_{nl} \bar{e}_{nl}$, ill. Z_{nl} valószínűségekre vezet, fizikailag valóban különbözők. Az egyik esetben az atom F_1 és F_2 között nem szenved el perturbációt, a másikban azonban a berendezés, mely a stacionárius állapotok meghatározását lehetővé teszi, perturbálja az atomot. E berendezés azt eredményezi, hogy az atom „fázisa” elvileg ellenőrizhetetlen értékkel megváltozik, éppúgy, ahogy az impulzus megváltozik az elektron helyének meghatározásakor (vö. 1. §). Az állapot meghatározására F_1 és F_2 között használt mágneses tér az E energiaértékeket „elhangolja”, az atomnyaláb pályájának megfigyelésekor (itt pl. Wilson-kamra felvételekre gondolok) az atomok statisztikusan különbözőképpen és ellenőrizhetetlenül fékeződést szenvednek. Ennek az a következménye, hogy a végső e_{nl} transzformációs mátrixot (mely az F_1 -be való belépés előtti energiaértékeket az F_2 -ből való kilépés utániakba transzformálja) többé nem $\sum_m c_{nm} d_{ml}$ adja meg, hanem ezen összeg minden egyes

tagja mellett fellép egy-egy ismeretlen fázistényező. Várható, hogy $e_{nl} \bar{e}_{nl}$ középértéke az összes ilyen esetleges fázisváltozásra Z_{nl} -l egyenlő. Egyszerű számítás mutatja, hogy ez valóban így van. — Eszerint bizonyos statisztikus szabályok szerint az egyik kísérletből következtethetünk valamely másiknak a lehetséges eredményeire. A második kísérlet maga a lehetőségek sokaságából kiválaszt egy meghatározottat és ezáltal az összes későbbi kísérletre vonatkozóan korlátozza a lehetőségeket. Az S transzformációs mátrixra vonatkozó egyenlet, azaz a Schrödinger-féle hullámegyenlet ilyen értelmezése csakis azért lehetséges, mert két megoldás összege újra megoldást szolgáltat. Ebben ismerhetjük fel a Schrödinger-egyenlet lineáris voltának mély értelmét; ennek folytán lehet azt csak a fázistérbeli hullámokra vonatkozó egyenletekért értelmezni és ezért tartunk kilátástalannak mindenfajta próbálkozást, melyek ezen egyenletet pl. a relativisztikus esetben (több elektromosra) nemlineáris egyenlettel kívánnák helyettesíteni.

3. § Áttérés a mikromechanikáról a makromechanikára. Az „elektron helye”, „sebesség”, „energia” stb. szavak értelmének az előző szakaszokban elvégzett elemzése révén a kvantumelméleti kinematika és mechanika fogalmai eléggé tisztázottaknak látszanak számomra ahhoz, hogy meg lehessen adni a makroszkopikus folyamatok szemléletes értelmezését is a kvantummechanika nézőpontjából. A mikromechanikára való áttérést már tárgyalta *Schrödinger* [6]; nem hiszem azonban, hogy *Schrödinger* megfontolása a probléma lényegét érintse, mégpedig a következő okokból: *Schrödinger* szerint a magasan gerjesztett állapotokban a sajátrezgések alkalmas összege eredményül egy nem túl nagy hullámcsomagot szolgáltat, mely maga — kiterjedését periodikusan változtatva — a klasszikus „elektron” periodikus mozgását végzi. Ezzel szemben a következő ellenvetés hozható fel: Ha a hullámcsomag az itt leírt tulajdonságokkal rendelkezne, úgy az atom által kibocsátott sugárzást Fourier-sorba lehetne fejteni, melyben a felrezgések frekvenciái valamely alapfrekvenciának egészszámú többszörösei. Az atom által kibocsátott színképvonalak frekvenciái azonban sohasem egész számú többszörösei valamely alapfrekvenciának, kivéve a harmonikus oszcillátor speciális esetét. *Schrödinger* megfontolása tehát csak a harmonikus oszcillátor általa tárgyalt esetében alkalmazható; az összes többi esetben a hullámcsomag az idők folyamán szétterjed az atom környezetét képező egész térrészre. Minél magasabb gerjesztett állapotban van az atom, annál lassabban következik be a hullámcsomag mondott szétszóródása. Mindenképpen bekövetkezik azonban, ha elég hosszú ideig várunk. A fent felhozott érvelés, melynek során az atom által kibocsátott sugárzásra utaltunk, minden fajta próbálkozással szemben alkalmazható, mely a kvantummechanikáról a klasszikus mechanikára való közvelen áttérést célozza a nagy kvantumszámok esetében. Ezért korábban megkísérelték, hogy az említett érvelés elől a stacionárius állapotok sugárzási szélességére hivatkozva térjenek ki; ez azonban bizonyosan nem jogosult, minthogy először is ez a kiút mindjárt a hidrogén atom esetében a magasan gerjesztett állapotok csekély sugárzása folytán nem járható, másodszor, a kvantummechanikáról a klasszikusra való áttérést anélkül is tisztázni kell tudnunk, hogy eközben az elektrodinamikához folyamodnánk. Ezen ismert nehézségekre, melyek a kvantumelmélet és a klasszikus elmélet közvetlen összekapcsolásának útjában állnak, korábban már *Bohr* [7] többen rámutatott. Csak azért világítottunk rá azokra ily részletekbe menően, mert újabban — úgy látszik — feledésbe merültek.

Azt hiszem, hogy a klasszikus „pálya” létrejötte pregnánsan így fogalmazható meg: *A „pálya” csak annak folytán jön létre, hogy azt megfigyeljük.* Legyen adva pl. valamely atom az 1000. gerjesztett állapotban. A pályaméretek itt már viszonylag nagyok, úgyhogy — megfelelően az 1. §-ban mondottaknak — elegendő az elektron helyének meghatározását viszonylag hosszúhullámú fénnel elvégezni. Ha azt akarjuk, hogy a hely meghatározása ne legyen túl pontatlan, úgy a Compton-visszálökődés azt fogja eredményezni, hogy az atom az ütközés után mondjuk a 950. és az 1050. gerjesztett állapot között fog valamelyik állapotban tartózkodni; ugyanakkor az elektron impulzusa az (1) összefüggésből meghatározható pontossággal a Doppler-effektus segítségével állapítható meg. Az így adott kísérleti tényállás a q -térben a fény hullámhossza által adott kiterjedésű hullámcsomaggal — jobban mondva valószínűség — csomaggal — jellemezhető, mely lényegében a 950. és 1050. sajátfüggvény közé eső sajátfüggvényekből tevődik össze, továbbá a megfelelő p -térbeli csomaggal. Bizonyos idő múltán végezzünk újabb helymeghatározást, hasonló pontossággal. Ennek eredménye a 2. § szerint csak statisztiku-

san adható meg; a helykoordináták valószínű értékei gyanánt az immár kiterjedt hullámcsomag belsejébe eső értékek jönnek tekintetbe, amelyekhez tartozó valószínűségek kiszámíthatók. Ez a klasszikus elméletben sem volna másképpen, hiszen az első helymeghatározás bizonytalansága folytán a másodiknak az eredményét a klasszikus elméletben is csak statisztikusan lehetne megadni; a rendszer állapotváltozásait jellemző pályák a klasszikus elméletben hasonlóképpen terjednének szét, mint a hullámcsomag. Minden esetre maguk a statisztikus törvények a kvantummechanikában és a klasszikus elméletben különbözők. A második helymeghatározás a lehetőségek sokféleségéből kiválaszt egy meghatározott „ q ”-t és az összes további meghatározásokra vonatkozóan korlátozza a lehetőségeket. Ahhoz, hogy a második helymeghatározás után a későbbi mérések eredményeit kiszámíthassuk, az elektronhoz ismét egy „kisebb”, λ (= a megfigyeléshez használt fény hullámhossza) kiterjedésű hullámcsomagot kell rendelnünk. A hullámcsomagot tehát minden helymeghatározás újra az eredeti λ kiterjedésére redukálja. A p és q változók „értékei” mindezen kísérletek során bizonyos pontossággal ismertek. Arra, hogy p és q értékei a pontosság ezen határai között a klasszikus mozgásegyenleteknek megfelelően változnak, közvetlenül a

$$\dot{p} = - \frac{\partial H}{\partial q}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (9)$$

kvantummechanikai törvényekből következtethetünk. A pálya azonban, mint mondtuk, csak statisztikusan számítható ki, ami a kezdeti feltételek elvi pontatlansága következményének tekinthető. A statisztikus törvények a kvantummechanika és a klasszikus elmélet esetében különbözők; ez bizonyos feltételek mellett durva makroszkopikus különbségeket eredményezhet a klasszikus és a kvantumelmélet között. Mielőtt erre példát adnánk, egy egyszerű mechanikai rendszer, az erőmentes mozgást végző tömegpont esetében szeretném megmutatni, hogy a klasszikus elméletre való áttérést, melyet fent tárgyaltunk miképpen kell matematikailag megfogalmazni. A mozgásegyenletek (egydimenziós mozgás esetén):

$$H = \frac{1}{2m} p^2; \quad \dot{q} = \frac{1}{m} p, \quad \dot{p} = 0. \quad (10)$$

Minthogy az idő paraméterként („ c -szám”-ként) kezelhető, ha időtől függő erők nem lépnek fel, így tehát a (10) egyenletek megoldása:

$$q = \frac{1}{m} p_0 t + q_0, \quad p = p_0; \quad (11)$$

itt p_0 és q_0 a $t=0$ időponthoz tartozó impulzust és helyet jelöli. Tegyük fel, hogy a $t=0$ időpontban [lásd a (3–6) egyenleteket] a mérés a q_1 pontossággal a $q_0 = q'$, a p_1 pontossággal a $p_0 = p'$ értéket szolgáltatta. Ahhoz, hogy a p_0 és q_0 „értékek”-ből q -nak a t időpontban érvényes „értékére” következtethessünk, Dirac és Jordan szerint meg kell határoznunk azt a transzformációs függvényt, amely mindazokat a mátrixokat, amelyek mellett q_0 átlós mátrixként jelentkezik, olyan mátrixokba transzformálja, amelyek mellett q jelenik meg diagonális mátrixként. A mátrixok azon rendszerében, amelyben q_0 mint átlós mátrix jelenik meg, p_0 a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_0}$ operá-

torral helyettesíthető. Dirac szerint [1. c. (11) egyenlet] ekkor a keresett $S(q_0, q)$ transzformációs amplitúdóra a következő differenciálegyenlet érvényes

$$\left\{ \frac{t}{m} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_0} + q_0 \right\} S(q_0, q) = q S(q_0, q), \quad (12)$$

$$\frac{t}{m} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial S}{\partial q_0} = (q_0 - q) S(q_0, q),$$

$$S(q_0, q) = \text{const } e^{\frac{2\pi i m \int (q - q_0) dq_0}{ht}}. \quad (13)$$

Eszerint S független q_0 -tól, azaz: ha a $t=0$ időpontban q_0 -t egzaktul ismerjük, úgy valamely $t>0$ időpontban q valamennyi értéke egyformán valószínű, vagyis annak valószínűsége, hogy q valamely véges tartományban fekszik, egyáltalában eltűnik. Ez azonban szemléletesen minden további nélkül világos is. Ugyanez természetesen bármely mechanikai rendszerre igaz volna. Ha azonban q_0 a $t=0$ időpontban csupán q_1 pontossággal és p_0 a p_1 pontossággal volt ismert [vö. (3) egyenlet]:

$$S(\eta, q_0) = \text{const } e^{-\frac{(q_0 - q')^2}{2q_1^2} - \frac{2\pi i}{h} p'(q_0 - q')},$$

úgy a q -ra vonatkozó valószínűségfüggvényt az

$$S(\eta, q) = \int S(\eta, q_0) S(q_0, q) dq_0$$

képletből számíthatjuk ki. Kapjuk:

$$S(\eta, q) = \text{const } \int e^{\frac{2\pi i m}{th} \left[q_0 \left(q - \frac{t}{m} p' \right) - \frac{q_0^2}{2} \right] - \frac{(q' - q_0)^2}{2q_1^2}} dq_0. \quad (14)$$

Bevezetve a

$$\beta = \frac{th}{2\pi m q_1^2} \quad (15)$$

rövidítést, (14) kitevője a

$$-\frac{1}{2q_1^2} \left\{ q_0^2 \left(1 + \frac{i}{\beta} \right) - 2q_0 \left(q' + \frac{i}{\beta} \left(q - \frac{t}{m} p' \right) \right) + q'^2 \right\}$$

alakot ölti. A q'^2 -et tartalmazó a const.-ba (a q -tól független tényezőbe) beolvasztható és az integráció az

$$S(\eta, q) = \text{const } e^{\frac{1}{2q_1^2} \frac{\left[q' + \frac{i}{\beta} \left(q - \frac{t}{m} p' \right) \right]^2}{1 + \frac{i}{\beta}}} \quad (16)$$

$$= \text{const } e^{-\frac{\left(q - \frac{t}{m} p' - i\beta q' \right)^2 \left(1 - \frac{i}{\beta} \right)}{2q_1^2 (1 + \beta^2)}}$$

eredményt adja. Innen következik:

$$S(\eta, q) \overline{S(\eta, q)} = \text{const } e^{-\frac{\left(q - \frac{t}{m} p' - q'\right)^2}{q_1^2(1+\beta^2)}}. \quad (17)$$

Az elektron eszerint a t időben a $\frac{t}{m} p' + q'$ helyen található a $q_1 \sqrt{1+\beta^2}$ pontossággal. A „hullámcsomag” vagy jobban mondva „valószínűség-csomag” a $\sqrt{1+\beta^2}$ faktossal nagyobb kiterjedésű lett. Mint (15) mutatja, β arányos a t idővel, fordítva arányos a tömeggel — ez közvetlenül hihető — és fordítva arányos q_1^2 -tel. Ha q_0 igen nagy pontossággal ismert, ebből következik, hogy p_0 pontatlansága igen nagy; mindez q esetében is nagy pontatlanságra vezet. Az η paramétert, melyet fent formális okokból vezettünk be, itt minden képletből el lehetett hagyni, minthogy az a számításban nem játszik szerepet.

Mint példával arra, hogy a klasszikus és a kvantumelméleti törvények különbözősége bizonyos körülmények között a két elmélet eredményei között durva makroszkopikus különbségekre vezet, foglalkozunk röviden az elektronok áramának visszaverődésével valamely rácson. Ha rácsállandó az elektronok de Broglie-hullámhosszával egyenlő nagyságrendű, úgy a visszaverődés bizonyos diszkrét térirányokban következik be, ugyanúgy mint a fény reflexiója valamely rácson. A klasszikus elmélet valami más, az előbbtől durva makroszkopikus módon különböző eredményre vezet. Ennek ellenére szó sincs arról, mintha az egyes elektronok pályáival kapcsolatosan a klasszikus elmélettel szemben fennálló ellentmondást lehetne kimutatni. Ilyen ellentmondás akkor lenne megállapítható, ha pl. az elektront valamely rácsvonal meghatározott pontjára irányítva azt találnánk, hogy a visszaverődés ott nem-klasszikus módon következik be. Ha azonban az elektron helyét oly pontosan akarnánk meghatározni, hogy megmondhassuk, a rácsvonal mely pontjára csapódik be, úgy az elektron ezen helymeghatározás által nagy sebességre tesz szert s de Broglie-hullámhossza oly kicsinné válik, hogy immár a visszaverődés adott közelítésben a klasszikusan előírt irányban következhet és következik be, anélkül, hogy mindez a kvantumelméleti törvényeknek ellentmondana.

4. § *Néhány speciális gondolat kísérlet tárgyalása.* A kvantumelmélet azon szemléletes értelmezése szerint, amelynek kifejtését itt megkíséreljük, az egyes átmenetek — a „kvantumugrások” — időpontjait éppúgy meg kell tudnunk állapítani mérés segítségével, mint mondjuk a stacionárius állapotok energiáit. A pontosságot, mellyel egy ilyen időpont megállapítható, a (2) egyenlet szerint $\frac{h}{\Delta E}$ adja meg [8], ahol ΔE az energia megváltozása a kvantumugráskor. Gondoljuk mondjuk a következő kísérletre: Valamely atom, mely a $t=0$ időpontban a 2 állapotban tartózkodik, menjen át sugárzás útján az 1 normálállapotba. Az atomhoz ekkor — pl. a (7) egyenlet mintájára — az

$$S(t, p) = e^{-\alpha t} \psi(E_2, p) e^{-\frac{2\pi i E_2 t}{h}} + \sqrt{1 - e^{-2\alpha t}} \psi(E_1, p) e^{-\frac{2\pi i E_1 t}{h}} \quad (18)$$

sajátfüggvény rendelhető hozzá; itt feltesszük, hogy a sugárzási csillapítás a sajátfüggvényekben egy $e^{-\alpha t}$ alakú tényezőn keresztül nyilvánul meg. A valószínűség talán nem ilyen egyszerű. Ezt az atomot energiájának megmérése céljából bo-

csássuk valamely inhomogén mágneses térben keresztül, amint az a Stern—Gerlach-kísérlet esetében szokásos, az inhomogén tér azonban kísérje az atomsugarat egy hosszú útszakaszon. A mindenkor gyorsulást alkalmasint oly módon fogjuk megmérni, hogy az atomsugár által a mágneses térben befutott távolságot kisebb szakaszokra osztjuk fel, melyek mindegyikének végén megállapítjuk a sugár eltérítését. Megfelelően az atomsugár sebességének, a kis szakaszokra való felosztás az idő kicsiny Δt intervallumokra való felosztásának felel meg. Az 1. § (2) egyenlete szerint a Δt időintervallumnak az energia $\frac{h}{\Delta t}$ pontossága felel meg. Annak valószínűsége, hogy az E meghatározott energiaértéket mérjük, közvetlenül nyerhető $S(p, E)$ -ből és így az $n\Delta t$ -tól $(n+1)\Delta t$ -ig terjedő intervallumban az

$$S(p, E) = \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} S(p, t) e^{\frac{2\pi i E t}{h}} dt$$

képlet segítségével számítható ki. Ha az $(n+1)\Delta t$ időpontban azt a megállapítást tesszük, hogy „az atom a 2 állapotban van”, úgy ami minden későbbit illet, az atomhoz többé nem a (18) sajátfüggvényt kell rendelnünk, hanem a (18)-ból (t -nek $t - (n+1)\Delta t$ -vel való helyettesítése útján adódót). Ha ezzel szemben azt állapítjuk meg, hogy „az atom az 1 állapotban van”, úgy ettől fogva az atomhoz a

$$\psi(E_1, p) e^{-\frac{2\pi i E_1 t}{h}}$$

sajátfüggvényt kell hozzárendelnünk. Először tehát a Δt intervallumok egy sorozatában a megfigyelés azt adja, hogy „az atom a 2 állapotban van”, majd egyfolytában „az atom az 1 állapotban van” lesz az eredmény. Annak érdekében, hogy a két állapot között még különbséget lehessen tenni, Δt -t nem szabad $\frac{h}{\Delta E}$ alá leszorítani. Ezen pontossággal határozható meg tehát az átmenet időpontja. Ha az energia ugrásszerű (diszkontinuus) változásáról beszélünk, az imént vázolt fajta kísérletet tartunk szem előtt, teljesen a kvantumelmélet régi, *Planck*, *Einstein* és *Bohr* által megalapozott felfogásainak szellemében. Minthogy az ilyen kísérletet elvileg el lehet végezni, kell, hogy kimenetelére vonatkozóan egyértelmű kijelentés legyen tehető.

A kvantumelmélet Bohr-féle alapposztulátumaiban az atom energiája, éppúgy mint a J hatásváltozók értékei, a többi állapothatározóval (mint az elektron helye stb.) szemben azáltal tűnnek ki, hogy számértékük mindenkor megadható. Ezt a kitüntetett szerepet, melyet a többi kvantummechanikai mennyiséggel ellentétben az energia betölt, annak köszönheti, hogy zárt rendszerek esetében a mozgásegyenletek egyik integrálját képezi (az energiamátrixra $E = \text{const.}$ érvényes); nem zárt rendszerek esetében ezzel szemben az energia nem foglal el kitüntetett helyzetet semmilyen más kvantummechanikai mennyiséggel szemben. Így megadhatók olyan kísérletek, melyekben az atom w fázisai egzaktul mérhetők, amelyekben azonban így az energia elvileg meghatározatlan marad, megfelelően a $\mathbf{J}w - w\mathbf{J} = \frac{h}{2\pi i}$ vagy a $J_1 w_1 \sim h$ relációnak. Ilyen kísérlet pl. a rezonanciafluoreszcencia. Sugározzuk be

az atomot valamely sajátfrekvenciával, mondjuk $\nu_{12} = \frac{E_2 - E_1}{h}$ -val, úgy az atom a külső sugárzással fázisban oszcillál; eközben elvileg nincs értelme megkérdezni, hogy ezen oszcillációját az atom az E_1 vagy az E_2 állapotban végzi. Az atom és a külső sugárzás között fennálló fázisviszony pl. sok atom egymásközötti fázisviszonya segítségével állapítható meg (*Woods* kísérletei). Ha a kísérletben sugárzást nem kívánunk felhasználni, úgy a fázisviszony a következőképpen is kimérhető: A beeső fény fázisához képest különböző időpontokban a 1. §-ban mondottak szerint (sok atomon) elvégezzük az elektron helyének pontos meghatározását. Az egyes atomokhoz ekkor az

$$S(q, t) = c_2 \psi_2(E_2, q) e^{-\frac{2\pi i(E_2 t + \beta)}{h}} + \sqrt{1 - c_2^2} \psi_1(E_1, q) e^{-\frac{2\pi i E_1 t}{h}} \quad (19)$$

„hullámfüggvényt” rendelhetjük; itt c_2 a beeső fény intenzitásától, β pedig a fázistól függ. A q helykoordináta valószínűsége tehát

$$S(q, t) \overline{S(q, t)} = c_2^2 \psi_2 \bar{\psi}_2 + (1 - c_2^2) \psi_1 \bar{\psi}_1 + \\ + c_2 \sqrt{1 - c_2^2} \left(\psi_2 \bar{\psi}_1 e^{-\frac{2\pi i}{h}[(E_2 - E_1)t + \beta]} + \bar{\psi}_2 \psi_1 e^{\frac{2\pi i}{h}[(E_2 - E_1)t + \beta]} \right). \quad (20)$$

A (20) kifejezés periodikus tagja a nem-periodikustól kísérletileg különválasztható, minthogy a helymeghatározásokat elvégezhetjük a beeső fény fázisának különböző értékei mellett.

Egy ismert, *Bohr* által megadott gondolatkísérletben valamely Stern—Gerlach-féle atomnyaláb atomjait először valamely meghatározott helyen fénybesugárzással rezonanciafluoreszcenciára gerjesztjük. Adott útszakasz után azok inhomogén mágneses térben haladnak át; az atomokból kibocsátott sugárzás az egész úton mindvégig megfigyelhető, mind a mágneses tér előtt, mind amögött. Mielőtt az atomok a mágneses térbe belépnének, közönséges rezonanciafluoreszcenciával van dolgunk, azaz: a diszperzió-elmélettel analógiában fel kell tennünk, hogy az összes atom a beeső fényrel fázisban gömbhullámokat bocsát ki. Ez utóbbi felfogás azonban mindjárt ellentmond annak, amit a fénykvantumok elméletének vagy a kvantumelmélet alapszabályainak nyers alkalmazásával kapunk; ezek alapján ugyanis arra a következtetésre jutnánk, hogy csupán kevés atom kerül fénykvantum elnyelésével a „felső állapotba”, a teljes rezonanciasugárzás így kis számú, intenzíven sugárzó gerjesztett centrumtól származnék. Kézenfekvő volt ezért korábban a következőket mondani: a fénykvantumok elképzelésére itt csak az energia-impulzus-mérleggel kapcsolatosan szabad hivatkoznunk, „a valóságban” valamennyi alsó állapotbeli atom gyengén és koherens módon gömbhullámokat sugároz ki. Miután azonban az atomok a mágneses térben áthaladtak, aligha lehet kétség afelől, hogy az atomnyaláb két nyalábra oszlott szét, melyek közül az egyik a felső, a másik az alsó állapotban levő atomoknak felel meg. Ha mármint az alsó állapotban levő atomok sugároznak, úgy itt az energiatétel durva megsértésével állnánk szemben, hiszen az egész gerjesztési energia a felső állapotban levő atomokat tartalmazó atomnyalábban foglaltatik. Ezzel szemben nyilván aligha lehet kétség afelől, hogy a mágneses tér mögött csak az egyik, a felső állapotban tartózkodó, intenzíven sugárzó atomtól származik. Mint *Bohr* megmutatta, ez a gondolatkísérlet világosan mutatja, milyen elővigyázatosságra van néha szükség a „stacionárius állapot” fo-

galmának alkalmazásakor. A kvantumelmélet itt kifejtett felfogásából kiindulva, a Bohr-féle kísérlet tárgyalása nehézség nélkül elvégezhető. A külső sugárzási térben az atomok fázisai meg vannak határozva, nincs tehát értelme az atom energiájáról beszélni. Még miután az atom el is hagyta a sugárzási teret, sem mondhatjuk, hogy az valamely meghatározott stacionárius állapotban tartózkodik, amennyiben a sugárzás koherenciátulajdonságai után tudakozódunk. Végezhetünk azonban kísérleteket annak megállapítására, hogy melyik állapotban van az atom; e kísérlet eredménye azonban csak statisztikusan adható meg. Az inhomogén mágneses tér ténylegesen ilyen kísérlet elvégzését jelenti. A mágneses tér után az atomok energiája meghatározott, a fázisok tehát meghatározatlanok. A sugárzás itt inkohereus módon történik és csak a *felső* állapotban levő atomok sugároznak. A mágneses tér meghatározza az energiákat s így elrontja a fázisviszonyokat. Bohr gondolatkísérlete igen szépen világítja meg azt a tényt, hogy az atom energiája „a valóságban” nem szám, hanem mátrix. A megmaradási tétel fennáll az energiamátrixra, s ennél fogva érvényes az energia értékeire is, a mérés mindenkor pontosságával. Számítás útján a határozott fázisviszonyok megszűnését a következőképpen lehet nyomonkövetni: Jelölje Q az atom súlypontjának koordinátáit; ekkor az atomhoz rendelt sajátfüggvény (19) helyett

$$S(Q, t)S(q, t) = S(Q, q, t) \quad (21)$$

lesz, ahol az $S(Q, t)$ függvény [a (16)-beli $S(\eta, q)$ -hoz hasonlóan] a Q -térnek csupán egy kicsiny környezetében különbözik zérustól és az atomok sebességével terjed tova a nyaláb irányában. Valamely q relatív amplitúdónak a valószínűségét tetszőszerinti Q mellett $S(Q, q, t)S(Q, q, t)$ -nek Q szerint képezett integrálja, vagyis (20) adja meg. A (21) sajátfüggvény azonban — mint az kiszámítható — a mágneses térben megváltozik és a felső, ill. alsó állapotú atomok által elszenvedett különböző eltérítés folytán a következő alakot ölti:

$$S(Q, q, t) = c_2 S_2(Q, t) \psi_2(E_2, q) e^{\frac{2\pi i (E_2 t + \beta)}{h}} + \sqrt{1 - c_2^2} S_1(Q, t) \psi_1(E_1, q) e^{\frac{2\pi i E_1 t}{h}}. \quad (22)$$

Itt $S_1(Q, t)$ és $S_2(Q, t)$ olyan, a Q -térben értelmezett függvények, amelyek csupán egy-egy pont kicsiny környezetében különböznek zérusból; e pont azonban S_1 -re más mint S_2 -re. Így $S_1 S_2$ mindenütt zérus. Valamely q relatív amplitúdó és adott Q érték valószínűsége ennél fogva

$$S(Q, q, t) \bar{S}(Q, q, t) = c_2^2 S_2 \bar{S}_2 \psi_2 \bar{\psi}_2 + (1 - c_2^2) S_1 \bar{S}_1 \psi_1 \bar{\psi}_1. \quad (23)$$

A periodikus tag eltűnt (20)-ból és ezzel együtt megszűnt a fázisviszony kimérésének lehetősége. A statisztikus helymeghatározás eredménye mindig ugyanaz lesz, függetlenül attól, hogy a mérést a beeső fény milyen fázisa mellett végezzük el. Feltehető, hogy sugárzás segítségével — melynek elmélete, mint ismeretes, még nincs kidolgozva — elvégzett kísérletek az atomoknak a beeső fényhez viszonyított fázisviszonyaira vonatkozóan ugyanezen eredményeket fogják adni.

Befejezésül hadd vizsgáljuk meg még a (2) alatti $E_1 t_1 \sim h$ egyenlet kapcsolatát az Ehrenfest és más szerzők [9] által a Bohr-féle korrespondencia-elv kapcsán két fontos dolgozatban tárgyalt probléma-komplexummal [10]. Ehrenfest és Tolman „gyenge kvantálás”-ról beszél, ha valamely kvantált periodikus mozgást kvantumugrások vagy más perturbációk olyan időközönként szakítanak meg, amelyek nem tekinthetők nagyon hosszúnak a rendszer periódusához viszonyítva. Ehrenfest és

Tolman szerint ebben az esetben nem csak az egzakt kvantumozott energiaszintek lépnek fel, hanem bizonyos kisebb értékű, kvalitatíve megadható *a priori* valószínűséggel olyan energiaértékek is, amelyek nem térnek el túl nagy mértékben a kvantumozott értékektől. A kvantummechanika keretei között ez a viselkedés így értelmezendő: Minthogy az energiát a külső perturbációk vagy a kvantumugrások ténylegesen megváltoztatják, így tehát minden energiamérésnek — ha azt kívánjuk, hogy az egyértelmű legyen — két perturbáció közé eső időben kell lejátszódnia. Ez t_1 -re egy felső határt ad meg (vö. 1. §). Valamely kvantált állapot E_0 energiáját is csak

$E_1 \sim \frac{t_1}{h}$ pontossággal mérhetjük meg. A kérdésnek, miszerint a rendszer „valóban”

rendelkezik-e — megfelelően kisebb statisztikus súllyal — az E_0 -tól eltérő E energiaértékekkel, vagy pedig azok kísérleti kimutatása csak a mérés pontatlanságából adódik, elvileg nincs értelme. Ha t_1 kisebb mint a rendszer periodusa, úgy nincs többé értelme diszkrét stacionárius állapotokról vagy diszkrét energiaértékekről beszélni.

Ehrenfest és Breit (l. c.) hasonló megfontolásokkal összefüggésben a következő paradoxonra hívják fel a figyelmet: Vegyünk szemügyre egy rotátort, melyet mondjuk mint fogaskereket gondolunk el. Tegyük fel, hogy ez el van látva egy olyan berendezéssel, mely a fogaskerék f számú fordulata után a forgásirányt ellentétesre változtatja. A fogaskerék illeszkedik mondjuk egy fogasrúdhhoz, mely maga két ütköző között egy egyenes mentén eltolható; az ütközők bizonyos számú fordulat után a rudat és vele együtt a kereket megfordulásra kényszerítik. A rendszer valószínű T periódusa hosszú a kerék egy fordulatának idejéhez képest; a diszkrét energiaszintek ennek megfelelően sűrűn fekszenek, mégpedig annál sűrűbben, minél nagyobb a periódus. Minthogy a következő kvantumelmélet szemszögéből tekintve minden stacionárius állapothoz egyenlő statisztikus súly tartozik, elég nagy T -re gyakorlatilag valamennyi energiaérték egyenlő gyakorisággal fordul elő, ellentétben azzal, amit a rotátor esetében kellene várnunk. Ez a paradoxon a mi szempontjainkból tekintve még élesebbé válik. Annak megállapításához ugyanis, vajon a rendszer kizárólag vagy különösen gyakran a tiszta rotátorhoz tartozó diszkrét energiaértékeket veszi-e fel, vagy pedig egyenlő valószínűséggel vesz fel minden lehetséges értéket (azaz: azokat az értékeket, amelyek a kicsiny $\frac{h}{T}$ energiaközöknek

felelnek meg), elegendő egy T -hez képest kicsiny (ugyanakkor azonban t -hez képest nagy) t_1 időköz; azaz: noha a nagyobbik periódus az ilyen mérések esetében egyáltalán nem érezteti hatását, látszólag azon keresztül nyilatkozik meg, hogy minden lehetséges energiaérték felléphet. Nézetünk szerint a rendszer összenergiájának meghatározása céljából végzett ilyen kísérletek valóban az összes lehetséges energiaértéket egyenlő valószínűséggel szolgáltatnák; ezért az eredményért azonban nem a T periódus, hanem az egyenes mentén eltolható rúd a felelős. Akkor is, ha a rendszer történetesen egyszer olyan állapotban tartózkodik, melynek energiája megfelel a rotátor kvantálásának, az a rúdra ható külső erők segítségével könnyen átvihető olyan állapotokba, amelyek nem a rotátorkvantálásnak felelnek meg [11]. A rotátorból és rúdból álló csatolt rendszer éppenséggel egészen más periodicitási tulajdonságokat mutat, mint a rotátor. A paradoxon megoldása valójában a következőkben rejlik: Ha egyedül a rotátor energiáját kívánjuk megmérni, először meg kell szüntetnünk a csatolást a rotátor és a rúd között. A klasszikus elméletben elég

kicsiny tömegű rúd esetében a csatolás energiaváltozás nélkül megszüntethető; ott tehát a teljes rendszer energiája a rotátoréval egyenlővé tehető (kis tömegű rúd esetén). A kvantummechanikában a rúd és kerék kölcsönhatási energiája legalább is ugyanolyan nagyságrendű, mint a rotátor energiaszintjeinek közei (kis tömegű rúd esetén is megmarad a kerék és rúd nagy zéruspontenergiája!); ha megszüntetjük a csatolást, helyreállnak külön a rúd és külön a kerék kvantumos energiaszintjei. Amennyiben tehát meg tudjuk mérni *egyedül* a rotátor energiaértékeit, a kísérlet által adott pontossággal mindenkor a kvantumos energiaértékeket kapjuk. A *csatolt* rendszer energiája azonban eltűnő rúdtömeg esetén is különbözik a rotátor energiájától; a csatolt rendszer energiája *minden* lehetséges (a T -kvantálás által megengedett) értéket egyenlő valószínűséggel vehet fel.

A kvantumelméleti kinematika és mechanika messzemenően különbözik a közönségestől. A klasszikus kinematikai és mechanikai fogalmak alkalmazhatóságára azonban sem gondolkodásunk törvényeiből, sem pedig a tapasztalatból nem következtethetünk; erre a megállapításra az (1) összefüggés: $p_1 q_1 \sim h$ jogosit fel. Minthogy az elektron impulzusa, helye, energiája stb. egzaktul definiált fogalmak, az nem képez akadályt, hogy a fundamentális (1) egyenlet csupán kvalitatív kijelentést foglal magában. Minthogy továbbá az elmélet kísérleti következményeit minden egyszerű esetben kvalitatíve el tudjuk gondolni, a kvantummechanikát többé nem kell nem-szemléletesnek és absztraktnak tekintenünk [12]. Mihelyt ezt elismerjük, természetes, ha azt szeretnénk, hogy a kvantummechanika kvantitatív törvényeit is közvetlenül a szemléletes alapokból, azaz lényegében az (1) összefüggésből lehesse levezetni. *Jordan* ebből a célból megkísérelte, hogy az

$$S(qq'') = \int S(qq') S(q'q'') dq'$$

egyenletet valószínűségi összefüggésként értelmezze. Ehhez a felfogáshoz azonban nem csatlakozhatunk (vö. 2. §). Ehelyett inkább úgy véljük, hogy a kvantitatív törvényeket a szemléletes alapokból kiindulva egyelőre csak a lehető maximális egyszerűség elvének megfelelően érthetjük meg. Ha pl. az elektron X -koordinátája nem szám többé, amint arra az (1) egyenlet szerint kísérletileg következtethetünk, úgy az elgondolható legegyszerűbb lehetőség [mely (1)-gyel nem áll ellentmondásban] az, hogy ez az X -koordináta átlós eleme valamely mátrixnak, melynek nem-átlós elemei a pontatlanságon keresztül, ill. transzformációk esetén más úton-módon (vö. pl. 4. §) nyilatkoznak meg. A kijelentés, hogy mondjuk az X -irányú sebesség „a valóságban” nem szám, hanem valamely mátrix átlós eleme, talán nem elvonatibb és kevésbé szemléletes, mint az a megállapítás, amely szerint az elektromos térerősség „a valóságban” a tér-idő-világ egy antiszimmetrikus tenzorának időbeli része. „A valóságban” kifejezés itt éppenannyira és éppoly kevésbé jogosult, mint bármely természeti folyamat matematikai leírása esetében. Mihelyt felismertük, hogy „a valóságban” minden kvantummechanikai mennyiség mátrix, a kvantitatív törvények nyomban nehézség nélkül következnek.

Ha feltesszük, hogy a kvantummechanika azon értelmezése, amelynek kifejtését itt megkíséreltük, a lényeges pontokat illetően helyes, úgy talán szabad néhány szóban annak elvi következményeivel foglalkoznunk. Azt, hogy a kvantumelmélet — a klasszikussal ellentétben — lényegesen statisztikus elmélet volna abban az értelemben, hogy egzaktul megadott adatokból csak statisztikus következtetések

volnának levonhatók, nem tettük fel. Az ilyen feltevésnek ellene szólnak pl. *Geiger* és *Bothe* ismert kísérletei. Ehelyett minden olyan esetben, amikor a klasszikus elméletben ténylegesen egzaktul mérhető mennyiségek között összefüggések állnak fenn, a megfelelő egzakt összefüggések a kvantumelméletben is érvényesek (impulzus- és energiatétel). A kauzalitás törvényének éles megfogalmazásában, mely szerint „ha a jelent pontosan ismerjük, úgy a jövőt kiszámíthatjuk”, nem az utóbbi következtetés, hanem az előfeltevés téves. A jelen, az azt meghatározó összes adat megismerése elvileg *nem lehetséges*. Ezért minden észlelés: választás a lehetőségek sokaságából és egyben: korlátozása a jövőben lehetségesnek. Minthogy a kvantumelmélet statisztikus jellege oly szoros kapcsolatban áll mindenfajta észlelés pontatlanságával, kísértést érezhetünk, hogy azon sejtésnek adjunk kifejezést, amely szerint az észlelt statisztikus világ mögött még egy „valóságos” világ rejlenék, melyben a kauzalitás törvénye érvényes. Az ilyen elméletek azonban — ezt kifejezetten hangsúlyozzuk — terméketlennek és értelmetlennek tűnnek számunkra. A fizikától csak azt kívánjuk, hogy formálisan leírja az észleletek kapcsolatát. A dolgok valódi állásának helyesebb jellemzése inkább így adható meg: Minthogy minden kísérlet a kvantummechanikának s azzal együtt az (1) egyenletnek van alávetve, a kvantummechanika a kauzalitás törvénye érvénytelenségének definitív megállapítását nyújtja.

Utólagos megjegyzések. Ezen munka lezárása után *Bohr* újabb vizsgálatai olyan szempontokhoz vezettek el, amelyek lehetővé teszik, hogy a kvantummechanikai fogalmak e munkában megkísérelt elemzését lényeges mértékben elmélyítsük és finomabbá tegyük. Ezzel kapcsolatban *Bohr* felhívta a figyelmemet arra, hogy e munka egyes megfontolásaiban lényeges pontok elkerülték a figyelmemet. Mindenek előtt a megfigyelés bizonytalansága nem kizárólag a diszkontinuitások felléptén alapszik, hanem közvetlenül összefügg azon követelménnyel, amely szerint egyszerre kell számot adnunk ama különféle tapasztalatokról, amelyek egyrészt a korpuszkuláris, másrészt a hullámelméletben nyernek kifejezést. Pl. az elgondolt gamma-sugár-mikroszkóp esetében tekintetbe veendő a sugárnyaláb szükségszerű divergenciája: ebből következik azután, hogy elektron helyének megállapításakor a Compton-visszalökődés iránya csupán bizonyos pontatlansággal ismert, mely végül az (1) összefüggésre vezet. Nem hangsúlyoztuk továbbá eléggé, hogy a Compton-effektus egyszerű elmélete szigorúan csak szabad elektronokra alkalmazható. A bizonytalansági reláció alkalmazása során ebből következően szükséges elővigyázatosság, mint azt Prof. *Bohr* tisztázta, többek között lényeges a mikro- és makromechanika között való átmenet minden vonatkozást felölelő taglalásával kapcsolatosan. Végül a rezonanciafluoreszcenciára vonatkozó megfontolások nem teljesen helytállóak, minthogy a fény, valamint az elektronmozgás kapcsolata nem oly egyszerű, amint azt feltételeztük. Azért, hogy *Bohr* említett újabb vizsgálatait, melyek egy a kvantumelmélet fogalmi felépítéséről írott dolgozatban rövidesen napvilágot látnak, in statu nascendi megismerhettem és megvitathattam, *Bohr* professzor úrnak őszinte köszönettel tartozom.

Fordította: Györgyi Géza

JEGYZETEK ÉS IRODALOM

[1] A jelen munka olyan törekvések és kívánságok eredményeképpen keletkezett, amelyeknek jóval a kvantummechanika létrejötte előtt más kutatók világos kifejezést adtak. Itt különösen *Bohr*-nak a kvantumelmélet alappozícióiról írott dolgozataira (pl. *ZS. f. Phys.* 13, 117, 1923) és *Einstein*-nek a hullámtér és a fénykvantumok kapcsolatát illető megfontolásaira kívánok emlékeztetni. Az itt megbeszélte problémákat legújabbban *W. Pauli* tárgyalta igen világosan s a felvetődő kérdéseket részben meg is válaszolta (*Quantentheorie*, *Hand. d. Phys.*, Bd. XXIII, a továbbiakban mint 1. c. idézve); a kvantummechanika e problémák *Pauli*-tól megadott megfogalmazásán csak keveset változtatott. Különös örömet jelent számomra ezen a helyen köszönetet mondani *W. Pauli* úrnak a sok ösztönzésért, melyet szóbeli és írásos eszmecseréinkből merítettem, és amely a jelen munkához jelentékenyen hozzájárult.

[2] A legutóbbi időben azonban nagy előrehaladást történt e területen *P. Dirac* munkái révén. [*Proc. Roy. Soc. (A)* 114, 243, 1927 és később megjelenő vizsgálatok].

[3] A de Broglie-hullámok statisztikus jelentését először *A. Einstein* fogalmazta meg (*Sitzungsber. d. preuß. Akad. d. Wiss.* 1925, 3. old.). E statisztikus elem fontos szerepet játszik azután *M. Born*, *W. Heisenberg* és *P. Jordan* kvantummechanikára vonatkozó fejtegetéseiben (*Quantenmechanik II*, *ZS. f. Phys.* 35, 557, 1926 és *Magyar Fizikai Folyóirat* 14, 35, 1966), különösen 4. fejj. 3. §) és *P. Jordan* munkájában (*ZS. f. Phys.* 37, 376, 1926); azt *M. Born* egy alapvető munkájában (*ZS. f. Phys.* 38, 803, 1926 és *Magyar Fizikai Folyóirat* 14, 436, 1966) matematikai elemzésnek vetette alá és az ütközési jelenségek értelmezésére használta fel. A valószínűségi feltevés megalapozása a mátrixok transzformáció-elméletéből kiindulva a következő munkákban található meg: *W. Heisenberg* (*ZS. f. Phys.* 40, 501, 1926), *P. Jordan* (vö. 40, 661, 1926), *W. Pauli* (megj. a *ZS. f. Phys.*-ben 41, 81, 1927), *P. Dirac* [*Proc. Roy. Soc. (A)* 113, 621, 1926], *P. Jordan* (*ZS. f. Phys.* 40, 809, 1926). A kvantummechanika statisztikus oldalát általánosságban tárgyalja *P. Jordan* (*Naturwiss.* 15, 105, 1927) és *M. Born* (*Naturwiss.* 15, 238, 1927).

[4] Vö. ezzel kapcsolatban *W. Pauli*, 1. c. 61. old.

[5] Vö. *P. Dirac*, *Proc. Roy. Soc. (A)* 112, 661, 1926 és *M. Born*, *ZS. f. Phys.* 40, 167, 1926.

[6] *E. Schrödinger*, *Naturwiss.* 14, 664, 1926.

[7] *N. Bohr*, *Grundpostulate der Quantentheorie*, 1. c.

[8] Vö. *W. Pauli*, 1. c. 12. old.

[9] *P. Ehrenfest* és *G. Breit*, *ZS. f. Phys.* 9, 207, 1922; *P. Ehrenfest* és *R. C. Tolman*, *Phys. Rev.* 24, 287, 1924; lásd még *N. Bohr*, *Grundpostulate der Quantentheorie* 1. c.

[10] E kapcsolatba *W. Pauli* hívta fel a figyelmemet.

[11] Ez *Ehrenfest* és *Breit* szerint a *kerékre* ható erők hatására *nem* vagy csak *ritkán* következhet be.

[12] *Schrödinger* a kvantummechanikát mint elriasztóan, vagy egyenesen visszaszatóan nem-szemléletes és absztrakt elméletet jellemzi. Kétségtelen, hogy a kvantummechanikai törvényekbe nyert matematikai (és *ennyiben* szemléletes) bepillantás, mely *Schrödinger* elméletének köszönhető, aligha túlbecsülhető értékű. Elvi, fizikai tekintetben azonban megítélésem szerint a hullámmechanika népszerű szemléletessége letérített arról az egyenes útról, amelyet egyrésztől *Einstein* és de Broglie munkái, másrésztől *Bohr* munkái és a kvantummechanika kijelöltek.

KÖNYVISMERTETÉS

W. F. Brown: Magnetoelastic Interactions

Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York 1966

A mágneseződési folyamatok modern elméletének kiindulásául a magnetoelasztikus kölcsönhatás, rövidebb néven magnetostrikció szolgált. Az ily módon igen fontos szerepet játszó magnetoelasztikus folyamatok elméletét R. Becker és munkatársai alapozták meg a harmincas években. Elméletét többen továbbfejlesztették, többek között e könyv szerzője. Első idevágó dolgozatát 1951-ben jelentette meg, amelyet több fontos dolgozat követett. 1964-re szisztematikus elméletté fejlesztette saját és mások eredményeit.

E munka tankönyvszerűen, rendszeresen tárgyalja a magnetoelasztikus kölcsönhatásokat. 4 fejezetben fejti ki az elméletet és annak alkalmazásait.

Az I. fejezetben a témára vonatkozó alapvető összefüggéseket és definíciókat találjuk világos, színvonalas leírásban.

A II. fejezet a deformálható mágneses anyagokban ható erők és feszültségek összefüggéseit tárgyalja. A szerző érdeme, hogy feloldja azt a látszólagos ellentmondást, amely a mágneses erők, valamint a mágneses feszültségek tárgyalása között más szerzőknél jelentkezett. Általános összefüggések és definíciók tárgyalása után a mágnesezhető rugalmas szilárd testek egyensúlyi állapotaival foglalkozik.

Az elmélet részletes ismertetését a III. fejezetben találhatjuk. A minimalizációs elv alapján megkeresi a mágneseződő rugalmas anyag egyensúlyának feltételeit. Részletesen, komoly matematikai apparátus mellett tárgyalja, hogy milyen részekből tevődik össze a szabadenergia: foglalkozik a kicserélődési energiával, az anizotropia energiával, a magnetostrikciós energiával és a rugalmas energiával. Kitér a mágneses saját energia kérdéseire is. A fejezet végén a különböző közelítéseket fejti ki, többek között a rövid hatótávolságú erők feltételezése esetén alkalmazható közelítést.

Az utolsó, IV. fejezetben alkalmazásokat mutat be a szerző nagy számmal. Részben demonstratív, részben gyakorlati jelentőségű az elmélet első alkalmazása, amikor a homogénen mágnesezett ellipszoidot tárgyalja igen részletesen és alaposan. A fejezet második részében a mikromágneses problémákkal foglalkozik, kitérve a disztribúciós problémára, a lineáris közelítésre és a köbös kristály esetére. Végezetül a nukleációs tér diszkusszióját találjuk e fejezetben.

A fejezetekhez matematikai kiegészítés, bőséges irodalmi hivatkozás, szerző index és tárgy index csatlakozik.

A könyv alkalmas arra, hogy a mágnesség elméletének alapjait ismerő szakemberek a magnetoelasztikus kölcsönhatások, a magnetostrikció elméletét magas szinten elsajátítsák.

Praveczi Endre

Technikai szerkesztő: Turchányi György
Műszaki szerkesztő: Merkly László
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
A kézirat beérkezett: 1966. X. 24. – Példányszám: 550 – Terjedelem: 9,45 (A/5) ív

67-6424 – Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖZLEMÉNYEI

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bata Lajos</i> : Kondenzált rendszerek mikrodinamikájának kísérleti vizsgálata neutronokkal ..	1
<i>Sárossy József és Székely Vladimír</i> : Térleképezések torzulásviszonyainak meghatározása differenciálgeometriai módszerekkel	49

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>W. Heisenberg</i> : A kvantumelméleti kinematika és mechanika szemléletes tartalmáról	87
--	----

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Iyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klaszszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhözde felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal,

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat
7. A szövegben az irodalmi utalásokat zárgjelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

RÖNTGENSUGÁRZÁS ÉS RADIOAKTÍV SUGÁRZÁSOK DÓZISMÉRÉSE KALORIMETRIKUS MÓDSZERREL*

HORDÓS MIKLÓS

Kossuth Lajos Tudományegyetem
Alkalmazott Fizikai Intézete, Debrecen

A cikk első részében leírjuk a kalorimetrikus mérési módszer elvét, második részében pedig különböző típusú mikrokalorimétereket ismertetünk.

A cikkből látható a kalorimetrikus módszer sokoldalúsága, univerzális jellege az ionizáló sugárzás dozimetriájában használt egyéb módszerekkel szemben.

I. Bevezetés

A kalorimetrikus sugárdózismérésben a sugárzás elnyelése következtében termelődő hőt használjuk fel a dózis meghatározására. Ennek a módszernek a segítségével a sugárzásmérés sok problémáját meg lehet oldani.

A kalorimetrikus módszert alkalmazhatjuk az összenergia mérésére, melyet pl. egy radioaktív forrás bocsátott ki, vagy egy sugárnyaláb összenergiájának mérésére. — A sugárforrás vagy sugárnyaláb összenergiájának meghatározásához az szükséges, hogy az abszorbens mérete és konstrukciója biztosítsa az összes sugárzás abszorpcióját, valamint, hogy az összes elnyelt energia hővé alakuljon át. Azonban még abban az esetben is, amikor ezen feltételek közül az egyik vagy másik nem teljesül a rendszer geometriai sajátosságai következtében, vagy az abszorbensben bekövetkező kémiai változások miatt, a kalorimetrikus módszert alkalmazhatjuk összehasonlító mérésekre.

A kalorimetrikus módszert a beeső sugárzás részleges abszorpciója esetén az anyag adott zárt térfogatában elnyelt dózis mérésére is használhatjuk.

A kérdés történetét tekintve azt lehet mondani, hogy bár a kalorimetrikus módszereket lehet használni különböző kérdések eldöntésére, alkalmazásuk az ionizáló sugárzások dozimetriai méréseinél korlátozott volt. Ennek a korlátozott alkalmazásnak az alapvető oka abban van, hogy a sugárzásnak viszonylag kicsi az energiája, s ez szükségessé tette, hogy a hőmérsékletváltozások rendkívül érzékeny mérési módszereit alkalmazzák. Ezzel szemben az ionizációs mérési módszerek technikailag sokkal egyszerűbbek és érzékenyebbek, s ez a tény erősen fékezte a kalorimetrikus módszer alkalmazásának fejlődését. — Az ionizációs módszerek azonban nem adják közvetlenül az elnyelt dózis vagy energiaáram mennyiségét, ugyanakkor ez a kalorimetrikus módszer segítségével teljesen megvalósítható. A kalorimetrikus módszernek az is előnye, hogy az lehetővé teszi a sugárzási energia mérését az alapvető energetikai egységekben.

A kalorimetrikus módszert már 1903-ban alkalmazta *P. Curie* és *A. Labord* [1], akik Bunsen-féle jégkaloriméterrel meghatározták a Ra^{226} és bomlástermékei sugár-

* Érkezett 1966. május 21.

zásának elnyelésekor keletkezett hőt. — A kalorimetrikus módszert később *Callendar* 1911-ben, majd *Rump* 1927-ben és *Stahel* 1929-ben alkalmazta [2]. *Callendar* a mikrokalorimetrikus mérésekhez a Peltier-effektus felhasználását javasolta. — *Rump* a röntgensugárzás elnyelésére higanyt használt. A higany egy légritka térben elhelyezett üvegedényben volt, mely hosszú kapillárisban folytatódott. A higanyoszlop magasságából a higanyabszorbens hőmérsékletváltozását meg lehetett határozni. — A kalorimetrikus módszert elsőként alkalmazó kutatók közé kell sorolnunk *Császár Elemért* is, aki az 1930-as évek közepén egyetlen Te—Ag termoelemmel érzékeny mikrokalorimétert szerkesztett [3].

II. A kalorimetria alapjai

A kaloriméterben az abszorbens és környezete közt hőcserélődés jön létre. Az abszorbens megfigyelt hőmérsékletváltozásának értelmezéséhez ismernünk kell a hőcserélődés tényleges sebességét. A hőcserélődés sebességét minimumra kell csökkenteni. — A hőátadást három külön folyamatra oszthatjuk fel: kisugárzás, áramlás és vezetés.

1. Hőátadás kisugárással

A kisugárzás útján való hőátadás: elektromágneses energiának az egyik testről a másikra való átvitele. A hőkisugárzás törvénye egy abszolút fekete testre az ismert Stephan—Boltzmann-formulával:

$$\frac{1}{A} \frac{dE}{dt} = \sigma T^4 \quad (\text{cal/cm}^2/\text{sec}), \quad (1)$$

ahol A a felület területe, E a teljes sugárzási energia, t idő, σ a Stephan—Boltzmann-állandó ($\sigma = 1,38 \cdot 10^{-12}$ cal/cm²/sec/°K⁴), T a fekete test abszolút hőmérséklete. A Stephan—Boltzmann formula egy tetszőleges testre:

$$\frac{1}{A} \frac{dE}{dt} = \varepsilon \sigma T^4 \quad (\text{cal/cm}^2/\text{sec}). \quad (2)$$

Az ε — emisszióképeség, jelenti azt a viszonyt, amely egy bizonyos felület által kibocsátott energia és az abszolút fekete test által kisugárzott energia közt van ugyanazon a hőmérsékleten.

A hőcserélődés mértékének kiszámítása egy felfüggesztett test és a környezete közt azt jelenti, hogy meg kell határozni valamennyi test által kibocsátott és elnyelt sugárzás részeit. Ekkor (2)-t a következő alakban írhatjuk:

$$\frac{1}{A} \frac{dE}{dt} = -\sigma F(T^4 - T_0^4) \quad (\text{cal/cm}^2/\text{sec}), \quad (3)$$

ahol F — a két felület emisszióképeségének és geometriájának a függvénye, T az abszorbens, T_0 — a környező közeg abszolút hőmérséklete. Az F pontos kiszámítása

még a legegyszerűbb geometria esetén is rendkívül bonyolult. McAdams kiszámította az F közelítőleges értékét egy zárt héj közepében felfüggesztett testre:

$$F = \frac{1}{\frac{1}{\varepsilon} + \frac{A}{A_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_0} - 1 \right)}, \quad (4)$$

ahol ε az abszorbens, ε_0 a héj emisszióképessége, A és A_0 az abszorbens ill. a héj területe.

A (3) egyenlet a következő alakban is írható:

$$\frac{dE}{dt} = -Ah_r(T - T_0) \quad (\text{cal/sec}), \quad (5)$$

ahol $h_r = \frac{\sigma F(T^4 - T_0^4)}{T - T_0}$ (cal/cm²/sec/grad). A h_r lényegében állandó adott héj-hőmérséklet és kis hőmérsékletváltozások esetén. A hőmérséklet 1 °C változásának megfelel a h_r 0,5%-os változása.

A sugárzás útján való hőátadást nagymértékben lecsökkenthetjük, ha az abszorbens és az edény felületét beüzüstözzük ($\varepsilon_0 = \varepsilon = 0,02$, s így F is kicsi lesz).

2. Hőátadás áramlás útján

Normális nyomásnál a levegőben a hőátadás főként áramlás útján valósul meg. Két párhuzamos lemez között a konvekció a R Rayleigh-féle számmal jellemezhető:

$$R = ad^3 \Delta T, \quad (6)$$

ahol d a két párhuzamos lemez közti távolság cm-ben, ΔT a hőmérsékletkülönbség °C-ban, az a a levegő konvekciómodulusa cm⁻³ grad⁻¹-ben. Akkor nem lép fel konvekció, ha $R < 1620$. Mivel az a konvekciómodulus arányos a levegő sűrűségének négyzetével, a sűrűség pedig a P nyomással, így abban az esetben nem lép fel konvekció, ha

$$\left(\frac{P}{760} \right)^2 < \frac{16,2}{d^3 \Delta T}. \quad (7)$$

Ez akkor teljesül, ha $d \approx 8$ cm, $\Delta T < 1$ °C és $P < 135$ Hgmm. Tehát a kaloriméterek többségénél a konvekció miatti hőveszteségek elhanyagolhatók.

3. Hőátadás vezetés útján

A hővezetéssel való hőátadást a következő egyenlet írja le:

$$\frac{dE}{dt} = -Ah_c(T - T_0) \quad (\text{cal/sec}), \quad (8)$$

ahol h_c a hővezetési együttható és a lemezek közti d távolság hányadosa. Hővezetés útján történik hőátadás az abszorbenshez vezető vezetékeken át, valamint az abszor-

bens és az edény közti levegő útján. A vezetékeken át történő hőveszteséget kis keresztmetszetű vezetékkel, a levegőben való hőveszteséget pedig az abszorbensnek és az edény falának beüzüstözésével, ill. ezüstfóliával való bevonásával csökkenthetjük.

*

A hőátadás valamennyi módja révén létrejövő hőcsere sebességének végleges kifejezését Newton lehűlési törvénye szerint a következő alakban írhatjuk:

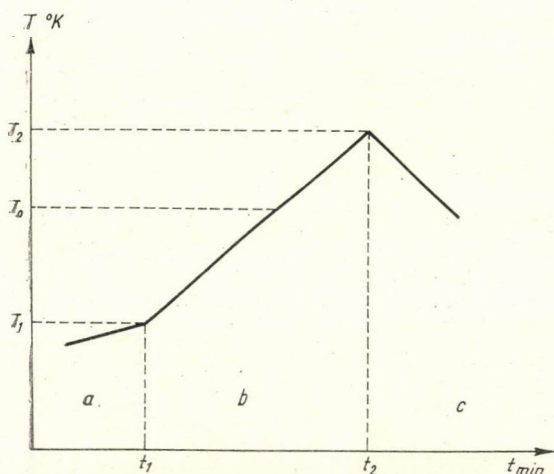
$$\frac{dE}{dt} = -A \sum_i h_i (T - T_0) \quad (\text{cal/sec}), \quad (9)$$

hol a $\sum_i h_i$ a sugárzás útján való hőátadásnak, az abszorbenshez vezető vezetékeken és a levegőn keresztül való hővezetés együtthatóinak az összege. Mivel $dE = mc dT$ (itt m az abszorbens tömege, c a fajhője), írhatjuk:

$$\frac{dT}{dt} = - \left(\frac{A}{mc} \sum_i h_i \right) (T - T_0) \quad (\text{grad/sec}). \quad (10)$$

A $(T - T_0)$ együtthatója sec^{-1} dimenziójú, és az abszorbens hőmérsékletváltozásának sebességét jelenti 1°C hőmérsékletkülönbség esetén; ezt K -val jelölve:

$$\frac{dT}{dt} = -K(T - T_0) \quad (\text{grad/sec}). \quad (11)$$



1. ábra. A kaloriméter felmelegedésének sematikus görbéje. A kaloriméter abszorbensébe az energia egyenletesen áramlik a $t_2 - t_1$ időintervallum alatt. Az a és c részekben az abszorbens hőmérséklete aszimptotikusan eléri az egyensúlyi hőmérsékletet Newton lehűlési törvényének megfelelően

Az abszorbens hőmérsékletének időbeli változását megfigyelhetjük a kaloriméterben. Ha az abszorbensbe energia jut be, annak hőmérséklete megnő. Ha azonban kívülről nincs energia-beáramlás, akkor az abszorbens hőmérsékletváltozása a közte és környezete közti hőcsere következtében jön létre. A kaloriméter felmelegedésének sematikus görbéje az 1. ábrán látható. Az a részben az abszorbens hőmérséklete aszimptotikusan közeledik az egyensúlyi hőmérséklethez, így t_1 -nél:

$$\left(\frac{dT}{dt} \right)_a = -K(T_1 - T_0) \quad (\text{grad/sec}). \quad (12a)$$

Hasonlóan a c részre:

$$\left(\frac{dT}{dt} \right)_c = -K(T_2 - T_0) \quad (\text{grad/sec}). \quad (12b)$$

A K állandó meghatározható az egyenletekből:

$$K = \frac{\left[\left(\frac{dT}{dt}\right)_a - \left(\frac{dT}{dt}\right)_c\right]}{T_2 - T_1} \quad (\text{sec}^{-1}). \quad (13)$$

A b részen a hőmérsékletváltozás $(dT/dt)_b$ megfigyelt sebessége a $(dT/dt)_x$ külső hatás és a $-K(T - T_0)$ hőveszteség eredményeképpen lép fel:

$$\left(\frac{dT}{dt}\right)_b = \left(\frac{dT}{dt}\right)_x - K(T - T_0) \quad (\text{grad/sec}). \quad (14)$$

Integrálva a kifejezést és behelyettesítve a K és T_0 értékét, a (12) és (13) egyenletekből a $(\Delta T)_x$ hőmérsékletváltozás, mely a külső hatás következtében jött létre:

$$(\Delta T)_x = T_2 - T_1 - \frac{1}{2} \left[\left(\frac{dT}{dt}\right)_a + \left(\frac{dT}{dt}\right)_c \right] (t_2 - t_1) \quad (\text{grad}). \quad (15)$$

Az analízisnél feltételeztük, hogy a hőmérsékletváltozás sebessége az 1. ábra mindhárom részében lineáris. A (15) egyenlet azt mondja ki, hogy a hőveszteség sebessége az abszorbensből a környező térségbe a hőnek kívülről történő behatolása idején egyenlő a bevezetése előtti és utáni veszteségének közepes sebességével.

*

A kaloriméter abszorbensét úgy kell megválasztani, hogy az majdnem teljesen nyelje el a rászó sugárzást. Ahhoz, hogy az abszorbens hőérzékenysége maximális legyen, az abszorbens anyagát úgy kell megválasztani, hogy adott hőhatás esetén elegendő nagy hőmérsékletváltozást kapjunk. Az abszorbens hőmérsékletváltozása 1 cal hő bevezetése esetén:

$$\frac{dT}{dE} = \frac{1}{mc} \quad (\text{grad/cal}). \quad (16)$$

A maximális hőmérsékletváltozáshoz az kell, hogy az abszorbens minimális mc értékkel rendelkezzen. Az abszorbens m tömege kisebb lesz, ha a fotonokra nézve nagy tömegabszorpciós koeficiensű anyagokat használunk. Tehát nagy foton-tömegabszorpciós koeficiensű és alacsony fajhőjű anyagokat kell használni. Kíváncsú nehéz elemeket használni abszorbensként, hogy méreteit, s ezekkel együtt hőveszteségeit csökkentsük.

III. Hőmérsékletmérés mikrokolorimétereknél

Modern mikrokolorimétereknél az abszorbens hőmérsékletváltozását termoelemmel (termooszloppal) vagy termisztorral mérik. Mivel egyrészt a termoelemek közismertek, másrészt egyre inkább a termisztor alkalmazzák, ezért csak ez utóbbit ismertetjük részletesebben.

A termisztoros hőmérsékletmérő tulajdonképpen ellenálláshőmérő. Az ellenálláshőmérő a hőmérsékletváltozásra érzékeny ellenállásból és egy berendezésből

áll, amely méri ennek az ellenállásnak a nagyságát. Korábban a leggyakrabban használt platinán kívül réz vagy arany fémeket alkalmaztak ellenálláshőmérőként. A platina hőmérsékleti együtthatója 20°C -nál $0,4\%$ 1°C -ra; tehát ahhoz, hogy

10^{-3}°C nagyságrendű hőmérséklet-változást mérjünk, a méréseket kb. $4 \cdot 10^{-4}\%$ pontossággal kell elvégezni.

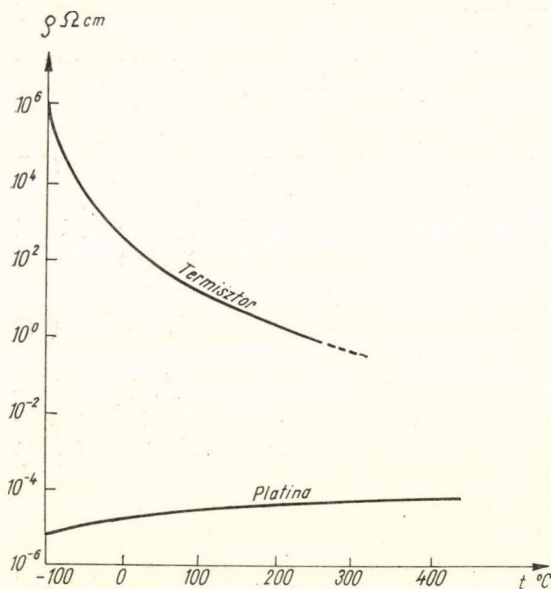
Az ellenálláshőmérő érzékenysége nagymértékben megnő, ha termisztort alkalmazunk. A termisztorokat fémoxidokból (nikkel, mangán, kobalt stb. oxidjaiból) készítik, amik félvezetők. A termisztor ellenállásának változása a hőmérséklettel a következő egyenlettel írható le:

$$R = R_0 e^{B \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0} \right)} \quad (\text{ohm}), \quad (17)$$

ahol R_0 és R a termisztor ellenállása T_0 és T abszolút hőmérsékleten, B konstans, értéke 3000 – 4000°K között van.

A hőmérsékleti együttható:

$$\alpha = \frac{1}{R} \frac{dR}{dT} = -\frac{B}{T^2}, \quad (18)$$



2. ábra. Egy termisztor fajlagos ellenállásának logaritmusa a hőmérséklet függvényében összehasonlítva a platinával

ami B értékét figyelembe véve, 20°C -on $-3,5\%$ -, illetve $-4,6\%$ -nak adódik 1°C -ra.

A 2. ábrán egy termisztor fajlagos ellenállásának logaritmusa látható a hőmérséklet függvényében, összehasonlítással a Pt-ra ugyanez.

A termisztor hőmérsékletváltozás okozta ellenállásváltozását leggyakrabban Wheatstone-híd segítségével mérjük.

IV. Mikrokalorimetrikus mérések

1. Összehasonlítás módszerével

Röntgensugárnyalábok energiájának összehasonlító méréseinél azonos konstrukciójú abszorbensekkel rendelkező kettős kalorimétereket használnak, amelyek azonos hőátadási jellemzőkkel rendelkeznek. Elengedhetetlen továbbá, hogy a környező közeg hőmérséklete egy és ugyanaz legyen mindkét kaloriméterre. Ezt úgy érhetjük el, ha a kalorimétereket elég nagy fajhőjű közös burokokban helyezzük el.

Hőérzékelő elemként termisztort alkalmaznak. A méréskor az egyik kaloriméter abszorbensében a beeső energia elnyelődése révén keletkező hőt a másik kaloriméter abszorbensének elektromos úton történő felmelegítésével kompenzálják.

A tényleges ellenállásváltozást Wheatstone-híddal mérjük. A Wheatstone-hídban a kettős kaloriméter termisztorai az ellentétes oldalakon találhatók.

A tényleges ellenállásváltozás:

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)_x = \frac{dR}{dt} + K(R - R_0) - K'(R' - R'_0) \quad (\text{ohm/sec}), \quad (19)$$

ahol a „vesszős”-jelű mennyiségek a kontrol-kaloriméterhez tartoznak, az anélküliek pedig a mérőhöz, a $\left(\frac{dR}{dt}\right)_x$ a tényleges ellenállásváltozás, amelyet mérni akartunk, az R_0 a termisztor ellenállása T_0 egyensúlyi hőmérsékleten.

2. Mikrokalorimetrikus mérések egy kaloriméterrel

Energia mérésére igen gyakran egy-kaloriméterrendszert használnak. A kalorimétert elektromos melegítés útján hitelesítik, és a hitelesítési adat alapján történik az ismeretlen energia kiszámítása.

Egy-kaloriméterre a következő egyenlet írható:

$$\left(\frac{dT}{dt}\right)_x = \frac{dT}{dt} + K(T - T_0) \quad (\text{grad/sec}), \quad (20)$$

ahol T_0 a kalorimétert körülvevő izotermikus burok hőmérséklete. Ha a mérendő hőmérsékletváltozások nagyobbak 10^{-6} grad/sec-nál és $K < 10^{-5} \text{ sec}^{-1}$ -nél, akkor ahhoz, hogy a hiba 0,1%-nál kisebb legyen, T_0 -nak a kísérlet folyamán kevesebb mint 10^{-4}°C -kal kell megváltoznia. Ezt elérhetjük, ha a kaloriméter abszorbense és az őt körülvevő izotermikus burok kettős izotermikus burokban van felfüggesztve, továbbá, ha a rendszert evakuáljuk és a kaloriméter abszorbensét és a burkokat beezüstözzük.

3. A kalorimetrikus berendezés hitelesítése

A kaloriméter hitelesítésénél az abszorbensbe helyezett fűtőellenálláson át egyenáramot vezetünk, amely a kaloriméter abszorbensében jól meghatározott hőmennyiséget termel. A bevezetett energiát az előzetesen meghatározott fűtőtekercsellenálláson létrejövő feszültségesés nagyságából határozzuk meg.

Az abszorbens felmelegedésének tipikus görbéje látható a 3. ábrán.

A hitelesítéshez az áramot a t_1 időpillanatban kapcsoljuk be és t_2 időpillanatban kapcsoljuk ki. A grafikonnak az elemzéséből felírhatjuk azt az egyenletet, amely lehetővé teszi a termisztor melegítéssel előidézett abszolút időbeli ellenállásváltozásának a kiértékelését:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{dR_b}{dt_b} - \frac{1}{2} \left(\frac{dR_a}{dt_a} + \frac{dR_c}{dt_c} \right) \quad (\text{ohm/sec}). \quad (21)$$

Az ellenállás teljes változása pedig

$$\Delta R = R_2 - R_1 - \frac{1}{2} \left(\frac{dR_a}{dt_a} + \frac{dR_c}{dt_c} \right) (t_1 - t_1) \quad (\text{ohm}). \quad (22)$$

A (21) és (22) egyenletben a jelölések egyeznek a 3. ábra jelöléseivel: R_1 az ellen-

állítás a t_1 időpillanatban, R_2 az ellenállás a t_2 időpillanatban, a dR_a, dR_b, dR_c a dt_a, dt_b, dt_c időintervallum alatt bekövetkezett ellenállásváltozás.

Ismerve a termisztor ellenállásának időbeli változását — dR/dt —, akkor a dT/dt felmelegedési sebességre kapjuk:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{dR}{dt} \frac{1}{\alpha R_t} 10^2 \quad (\text{grad/min}), \quad (23)$$

ahol α -t a (18) egyenlettel értelmeztük, R_t pedig a dt_b időtartam alatt mért termisztoellenállás középértéke.

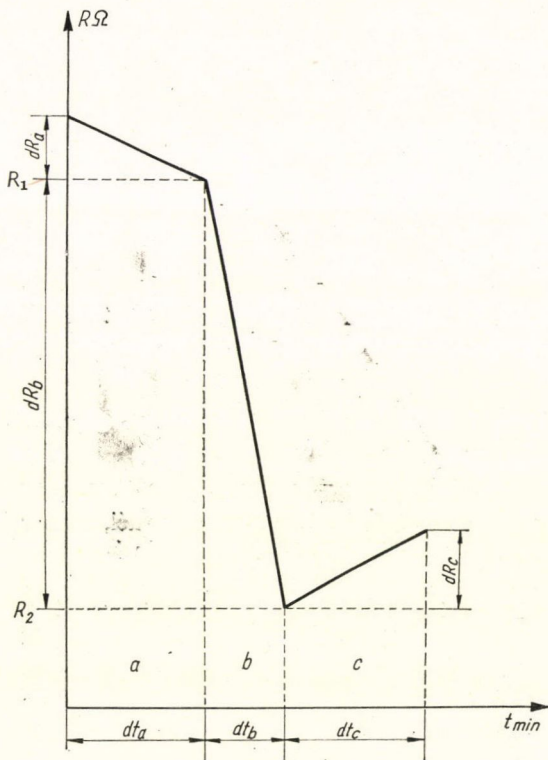
Az abszorbens dT/dt hőmérsékletemelkedési sebessége csak a hőforrás teljesítményétől (a dózisintenzitástól) — a P -től és az abszorbens anyagának c fajhőjétől függ. Érvényes tehát:

$$P = 4,18 \cdot c \frac{dT}{dt} 10^5, \quad (24)$$

ahol P rad/min-ban, a c cal/g/grad-ban, a dT/dt grad/min-ban van behelyettesítve, a $4,18 \cdot 10^5$ faktor a cal és a rad közti átszámítási tényező.

A dózisintenzitás mérése tehát az abszorbens dT/dt hőmérsékletváltozási sebességének a mérésére redukálódik. Ennek mérését a fentiekben már tárgyaltuk.

*



3. ábra. Az abszorbens felmelegedésének tipikus görbéje. A grafikon a termisztor időbeli ellenállásváltozását mutatja, melyet az abszorbens hőmérsékletváltozása idéz elő a) az áram bekapcsolása előtt, b) az áram bekapcsolása alatt, c) az áram kikapcsolása után

Az előzőekben leírt módszeren kívül másképpen is meghatározhatjuk a P értékét. Térjünk vissza a (10) egyenlethez s azt írjuk a következő alakban:

$$mcdt + AH(T - T_0)dt = 0 \quad (\text{cal}), \quad (25)$$

ahol a $H = \sum_i h_i$, azaz az abszorbens hőátadási együtthatóinak összege, a többi mennyiség jelentését korábban már megadtuk. Legyen most egy P cal/sec teljesítményű hőforrás is a rendszerben, akkor a következő egyenletet írhatjuk fel [4]:

$$Pdt = mcdT + AH(T - T_0)dt \quad (\text{cal}). \quad (26)$$

A melegedés kezdetére ($t=0$) nyilvánvalóan fennáll, hogy $T = T_0$. A (26) egyenlet megoldása:

$$T - T_0 = \frac{P}{AH} \left(1 - e^{-\frac{AHt}{mc}} \right) \quad (\text{grad}). \quad (27)$$

$t \rightarrow \infty$ -nél

$$T - T_0 = \frac{P}{AH} \quad (\text{grad}). \quad (28)$$

A (27) és (28) egyenlet azt mutatja, hogy elegendő nagy idő alatt hőegyensúly áll be, a hőmérsékletkülönbség aztán állandó marad: $T - T_0$.

Ennek a hőmérsékletkülönbségnek a határértéke a forrás P hőteljesítményével egyenesen, az abszorbens A felületével és H hőátadási együtthatójával fordítva arányos. Ezért a kaloriméter érzékenységének növelésére az abszorbens méreteit csökkenteni kell, felületét pedig beezüstözik és fényesre polírozzák. Az érzékenység növelésével viszont megnő a hőegyensúly elérésének időtartama, mint ez a (27) egyenletből látható. Az abszorbens és környezete közötti $T - T_0$ hőmérsékletkülönbséget termoelemmel mérhetjük. A hitelesítést ismert elektromos energia bevitele útján végezhetjük el.

V. Mikrokalorimetrikus berendezések

A következőkben néhány tipikus kalorimétert ismertetünk, melyeket napjainkban használnak a radioaktív izotópok dozimetriájában, a reaktorok sugárzásának mérésére, valamint a röntgensugarak dozimetriájában.

A radioaktív izotópok dozimetriájában a kalorimetrikus módszer alapelve a következő: a sugárzás teljes abszorpciója esetén az időegység alatt keletkezett Q hőmennyiség arányos az egy bomláskor keletkezett E energia és a forrás A aktivitása szorzatával:

$$Q = 5,09 \cdot EA. \quad (29)$$

Az egyenletben a Q cal/óra-ban, E MeV-ben, A curie-ben van kifejezve, az 5,09 számkonstans a MeV és cal közti összefüggést ($1 \text{ MeV} = 3,822 \cdot 10^{-14} \text{ cal}$), továbbá azt fejezi ki, hogy a bomlásokat 1 órára vonatkoztatjuk ($1 \text{ C} = 1,332 \cdot 10^{14} \text{ bomlás/óra}$).

Kalorimetrikus módszerrel tehát mérni tudjuk radioaktív izotópok aktivitását, ha ismerjük az E bomlásonkénti energiát.

Mikrokaloriméterrel mérhető 0,01–0,1 cal/óra hőteljesítményű források, de vannak 0,005 cal/óra hőteljesítményt is kielégítő pontossággal mérő mikrokaloriméterek. A kalorimetrikus módszert csak azoknál a sugárforrásoknál használhatjuk, amelyeknek a felezési ideje hosszabb 1 napnál, mivel a kaloriméterekben a hőegyensúly beállításához néhány óra szükséges. Ezzel szemben a kalorimetrikus aktivitásmérésnek több előnye van más módszerekkel szemben:

1. A mérést nem befolyásolja a sugárforrás elhelyezésének geometriája, nem szükséges különösebb preparálás, nem kell figyelembe venni az alátét visszaszórásának hatását;

2. nem kell ismerni az önabszorpciós faktort;

3. lehetséges — sőt előnyös — nagy aktivitású források mérése, míg az ionizációs és GM-csöves módszereknél a nagyobb aktivitások mérését korlátozza a feloldóképesség;

4. a kalorimetriás módszer lehetővé teszi az α -, β -, és γ -aktivitások egyidejű mérését.

1. α - és β -sugárzók aktivitásának mérése

Az α - és β -sugárzók aktivitásának mérésére szolgáló kaloriméterek abszorbensek lehet kis terjedelmű és kis súlyú, mégis gyakorlatilag mindig elérhető a sugárzás teljes elnyelődése. Ha a sugárforrás γ -sugárzást is bocsát ki, akkor az abszorbens vékony falú kell legyen, hogy csak az α és β nyelődjön el. — A tiszta β -sugárzók mérése könnyebb. Ilyen célra szerkesztett J. G. Bayly [5] differenciálkalorimétert, melyet a P^{32} izotóp aktivitásának mérésére használtak. A mért preparátum aktivitása 11,6 mC volt.

A kaloriméter egyik felének sémája a 4. ábrán látható.

A C 20 mm átmérőjű acélhenger-köpenyen belül A ezüst-edényke helyezkedik el, amelybe a mérendő radioizotópot helyezik. A másik felében hasonló kis edény van szimmetrikusan elhelyezve fűtőelemmel. Az edényke egy B celluloid tartóra van erősítve. — Méréskor a preparátum által az egyik edénykében fejlesztett hő összehasonlítja a fűtőelem által azonos külső feltételek mellett fejlesztett hővel,

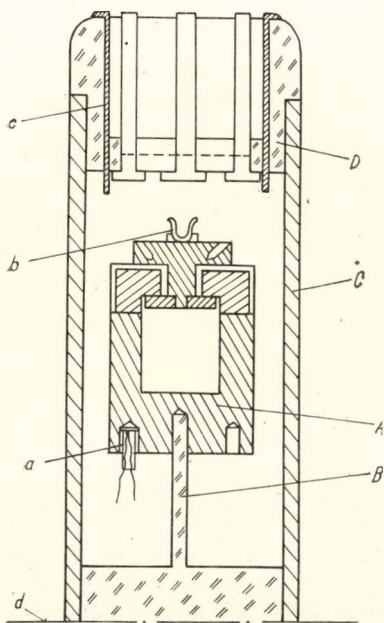
mely az előbbivel azonos hőmérsékletváltozást idéz elő a második edénykében. A hőmérsékletváltozás mérése az a termisztorokkal történik, melyek az edényké alsó, vastagabb részébe vannak rögzítve, s melyek érzékeny galvanométerrel ellátott Wheatstone-hídba vannak kapcsolva.

Az egész rendszer termosztátban van elhelyezve, így a környezet hőmérsékletét konstans értéken tartják $\pm 0,05^\circ\text{C}$ hibával.

Az α -források hitelesítésére példaként megemlíthetjük a Cm^{242} felezési idejének mérését, melyet Harwellben végeztek el [6] a fentiekben leírt kaloriméterhez hasonló kettős kaloriméterrel.

Az α - és β -sugárzók dozimetriájában használt kaloriméterek másfajta elterjedt típusa az alacsony hőmérsékletű izotermikus kaloriméterek. Az ilyen típusú újabb kaloriméterek mintájának tekinthetjük J. W. Stout és W. M. Jones [7] munkájában leírt folyékony nitrogénes izotermikus kalorimétert. Ezzel a kaloriméterrel mérték a 120 g súlyú Pu^{239} minta bomlásakor keletkezett hőt, melyből a Pu^{239} felezési idejét számították.

Az ilyen típusú kaloriméterek sémája az 5. ábrán látható. Az A Dewar-üvegedény alján a C sárgaréz-edényben a B fémplutónium van elhelyezve, továbbá a D hitelesítő fűtőtekercs c, d vörösréz és wolfram kivezetésekkel. Az E cső az edény felső részében a gáz térfogatának mérésére szolgáló rendszerhez csatlakozik. Az egész Dewar-edény egy másik edényben helyezkedik el,



4. ábra. Tipikus β differenciál kaloriméter. A — ezüstedény, amelybe a mérendő radioizotópot helyezik; B — celluloid tartó; C — acélhengerköpeny; D — celluloid fej az elektromos csatlakozókkal; a — üvegbe forrasztott termisztor; b — kengyel a hitelesítő fűtőelem rögzítésére; c — elektromos kivezetés; d — szimmetriatengely: a kaloriméter másik fele hasonlóképpen van meg szerkesztve

amely folyékony nitrogénnel van megtöltve. A belső edénybe tiszta nitrogéngázt engednek, amely ott kondenzálódik.

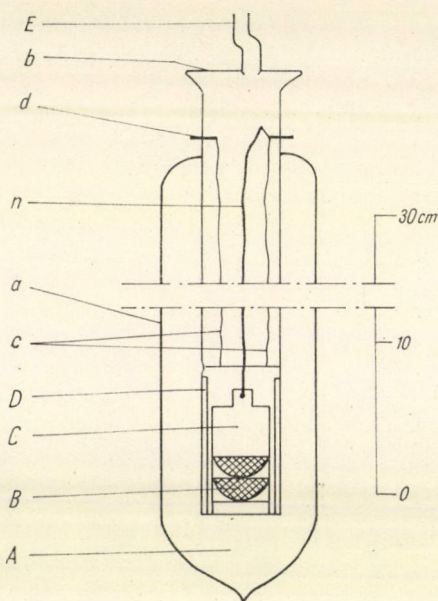
Mérik a keletkezett nitrogén mennyiségét, amely a Pu^{239} bomlásakor felszabaduló hő következtében párolog el. A külső Dewar-edény hőmérséklete konstans kell legyen $\pm 0,1^\circ\text{C}$ pontossággal, melyet az *a* és *b* helyeknél termoelemekkel ellenőriznek.

Hasonló, azonban lényegesen tökéletesített alacsony hőmérsékletű kalorimétert ír le munkájában *C. V. Cannon* és *G. H. Jenks* [8]. A kalorimetrikus berendezés három közös tengelyű Dewar-edényből áll, amelyek folyékony nitrogénnel vannak megtöltve. A készüléket a belső edényben helyezik el, a középső edény termosztátként szolgál, a külső pedig a hőszigetelő szerepét tölti be. A tökéletesen konstans hőmérsékleten felszabaduló nitrogén elpárolgásának sebessége az abszorbeált sugárzás energetikai áramlásával arányos. A hőmérséklet szabályozása és az elpárolgott gáz térfogatának mérése automatikus. A belső edény munkatérfogata 10 cm^3 . A legkisebb hőteljesítmény, mely ezzel a kaloriméterrel 1%-os pontossággal mérhető, $2,5 \cdot 10^{-2}\text{ cal/óra}$. Ezzel a kaloriméterrel mérték 25 mC P^{32} minta aktivitását, továbbá meghatározták a trícium felezési idejét és közepes bomlási energiáját.

Az alacsony hőmérsékletű kaloriméterek érzékenysége fokozható, ha a rendszerben még a nitrogénnél is alacsonyabb forráspontú folyékony gázt használnak s abszorbensként ólmot vagy wolframot alkalmaznak, amely fémek fajhője az abszolút 0 fok közelében jelentős mértékben csökken. A folyékony hélium $1,3^\circ\text{K}$ hőmérsékleténél pl. az 1 cm^3 wolfram abszorbenssel rendelkező kaloriméter mérhetné a 10^{-6} cal/óra nagyságrendű hőteljesítményt. (Az ilyen kaloriméter mérhetné pl. azt a hőt, amelyet $0,1\text{ mC}$ radon és bomlástermékeinek sugárzása okoz 3 cm távolságban az abszorbenstől). — *G. H. Jenks* és *F. H. Sweeton* készítettek folyékony héliumos kalorimétert és mérték a C^{14} felezési idejét és közepes β -energiáját.

2. γ -sugárzók aktivitásának mérése

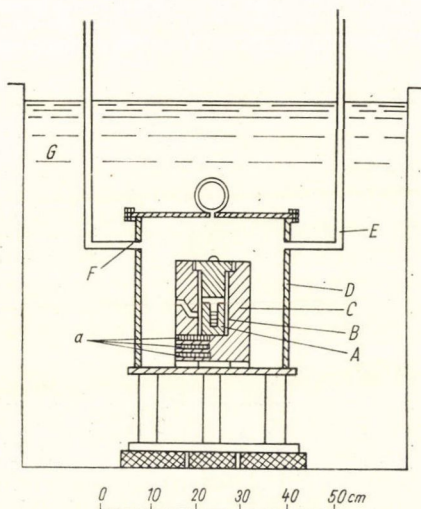
A tiszta γ -sugárzók aktivitásának kalorimetrikus mérésekor bizonyos nehézségek támadnak, mert a γ -sugárzás teljes elnyeléséhez nagy tömegű abszorbens szükséges. Az abszorbens nagy tömege miatt viszont növekszik a kaloriméter hőkapacitása, ami ellentétben van a mikrokalorimetria alapelveinek egyikével. Ezért gyakorlatilag optimális méretű abszorbeneket készítenek és az abszorbeálatlan sugárzási részre számítást vagy kiegészítő mérést végeznek.



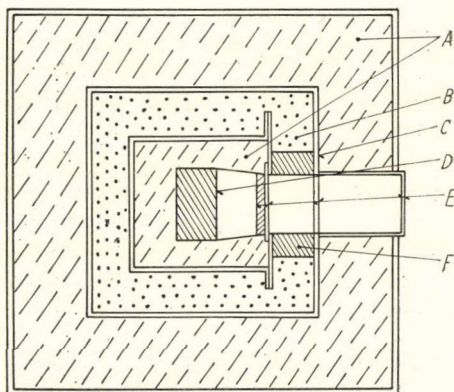
5. ábra. Folyékony nitrogénes izotermikus kaloriméter. *A* — Dewar-üvegedény; *B* — fém plutónium; *C* — sárgaréz edényke; *D* — hitelesítő fűtőtekercs; *E* — az elpárolgott nitrogént elvezető cső; *a*, *b* — a termoelemek helye; *c*, *d* — a fűtőtekercsek elektromos kivezetései; *n* — felfüggesztő szál

K. K. Aglicev és E. A. Cholnova [9, 10] munkáikban differenciál-gömb — γ — kalorimétert írnak le, melyet 0,432 és 1,79 C Co^{60} minták hitelesítésére használtak 3% pontossággal. A kaloriméter két ólomgömbből áll, amelyek vörösréz tömbből készült termosztátban vannak elhelyezve. Minden golyón belül van egy nyílás a minta vagy a hitelesítő tekercs behelyezésére. A hőmérsékletkülönbséget a preparátummal ellátott és a preparátum nélküli golyó között 18—24 termoelemből álló termoszloppal mérték.

Egy újabb munkájában [11] E. A. Cholnova más alapelvű kalorimétert, higany- γ -kalorimétert ír le, amely tulajdonképpen hőmérő. Vörösréz tömbben két 60 mm átmérőjű üveggömb van, melyeket higannyal töltenek meg és kapillárisban végződnek. Az edénybe minta helyezhető. A kb. 1,5 kg súlyú higany egyben a γ -sugárzás abszorbense is; felmelegedéskor térfogata megnő. A hitelesített kapillárison lehet leolvasni a hőmérsékletváltozást; 0,01 °C-nak 51 mm beosztás felel meg, tehát 10^{-4} °C nagyságrendű hőmérsékletváltozást lehet leolvasni, ami 2—5 mC aktivitású Co^{60} forrás mérését teszi lehetővé.



6. ábra. γ -kaloriméter rajza. A — a mérendő preparátum; B — hitelesítő fűtőtekercs; C — ólomabszorbens; D — acéledény; E — elszívócső; F — elektromos kivezetések csöve; G — vízfürdő; a — termisztorok



7. ábra. γ -kaloriméter külső sugárnyalábok mérésére. A — hőszigetelés; B — vízfürdő; C — sárgaréz köpeny; D — ólomabszorbens; E — vékony ablakok; F — utolsó kollimátor

A γ -aktivitás mérésére használt más típusú kaloriméter a 6. ábrán látható, melyet I. T. Myers [12] ír le munkájában. A mérendő A minta és a B hitelesítő fűtőtekercs egy kb. 150 mm átmérőjű D acéledényben elhelyezett ólomabszorbensbe kerül. Az abszorbens hőmérsékletének emelkedését az a termisztorokkal mérik, melyek az abszorbensben különböző helyeken vannak elhelyezve; ellenállásváltozásukat Wheatstone-híddal mérik. A legkisebb mérhető hőmérsékletváltozás $3 \cdot 10^{-4}$ °C. Termosztátként a G vízfürdő szolgál (kb. 750 l), melynek hőmérsékletét termisztoros

Wheatstone-híd segítségével $0,001\text{--}0,002\text{ }^{\circ}\text{C}$ pontossággal automatikusan konstans szinten tartják. Ezzel a berendezéssel mérték a $2,106$ curie aktivitású Co^{60} sugárforrást $0,7\%$ pontossággal.

A kaloriméter abszorbense folyadék is lehet. Éppen ezért a kaloriméterek nagyon alkalmasak a folyékony kémiai doziméterek abszolút hitelesítésére [13].

A Co^{60} és Cs^{137} erős forrásokat az ipari defektoszkópiában vagy a gyógyászatban külső γ -sugárnyalábbal való besugárzásra használják. A külső γ -sugárnyalábok jellemzőinek vizsgálatára az erre a célra szerkesztett kaloriméterek szolgálnak. Ilyen típusú kalorimétert szerkesztett pl. *P. N. Goodwin* [14] és mérte az 1400 curie-s Cs^{137} γ -sugárnyalábjának intenzitását. A kaloriméter sematikus rajza a 7. ábrán látható.

Az abszorbens egy $10,2$ cm átmérőjű, $5,7$ cm vastag ólomhenger, mely nylon-fonálon függ egy sárgaréz edény belsejében. Az ólomabszorbensben zománcozott ellenállásdrótból fűtőtekercs van elhelyezve, hőérzékelőként pedig termisztor szolgál. Az ólomhenger santocell szigetelőanyaggal van körülvéve, amely olyan jó hőszigetelő, mint az $1\text{--}10^{-2}$ Hgmm vákuum. A sárgaréztank víztartályban foglal helyet, melynek a hőmérséklete termosztálás nélkül sem változott 10^{-3} grad/min-nál nagyobb mértékben, ha a víztartályt 10 cm santocell szigetelő anyaggal vették körül és a szoba hőmérsékletét közel konstans értéken tartották.

A mérési eredményeket összehasonlítva az ionizációs mérések eredményeivel, a 662 keV energiájú γ -sugárnyalábra (2959 ± 44) erg/cm²/r átszámítási faktor adódott. Ebből és az abszorpciós koefficiens számított értékéből az egy ionpár keletkezéséhez szükséges energiát a levegőben $W = (33,9 \pm 0,5)$ eV értéknek számította.

Hasonló kalorimétert készített *S. Genna* és *J. S. Laughlin* [15], továbbá *H. E. Johns és társai* [16] a Co^{60} γ -sugárnyalábjainak vizsgálatára.

A gyorsítók nagyenergiájú X-sugárnyalábjai intenzitásának mérésére szolgáló kaloriméterek szerkezete lényegében nem különbözik a 7. ábrán bemutatott γ -kalorimétertől. Ezek szerkezetét és mérési módszerét *Z. Kovář* írja le összefoglaló munkájában [17]. Újabb munka *N. G. Afanaszjev és társai* [18] által készített kaloriméter.

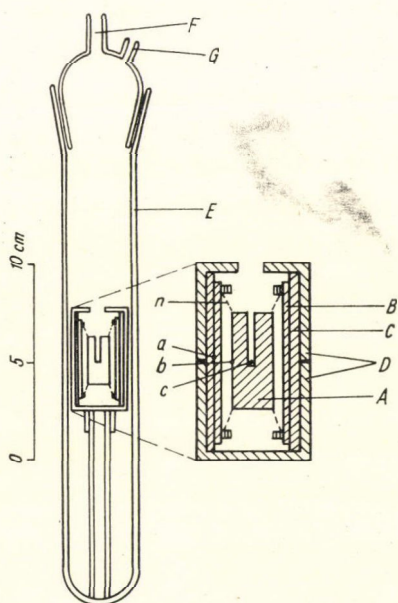
A γ -sugárzás és a nagyenergiájú X-sugárzás mérésére használnak alacsony hőmérsékletű izotermikus kalorimétereket is, így a nagyobb tömegű abszorbens alkalmazása mellett is kicsi marad az abszorbens hőkapacitása, mivel sok anyag fajhője az igen alacsony hőmérsékleten lényegesen csökken. Ilyen folyékony nitrogén izotermikus kalorimétert szerkesztettek a leningrádi Fizikai Intézetben (részletes leírása megtalálható a [17] ill. [19] cikkben).

Az $50\text{--}250$ keV maximális energiájú röntgen-sugárnyalábok intenzitásának mérésére szolgáló kaloriméterek is a 7. ábrán bemutatott γ -kaloriméterhez hasonló szerkezetűek. Ilyen típusú kaloriméterek leírását és a velük való méréseket megtalálhatjuk a [3], [20] és [21] munkákban.

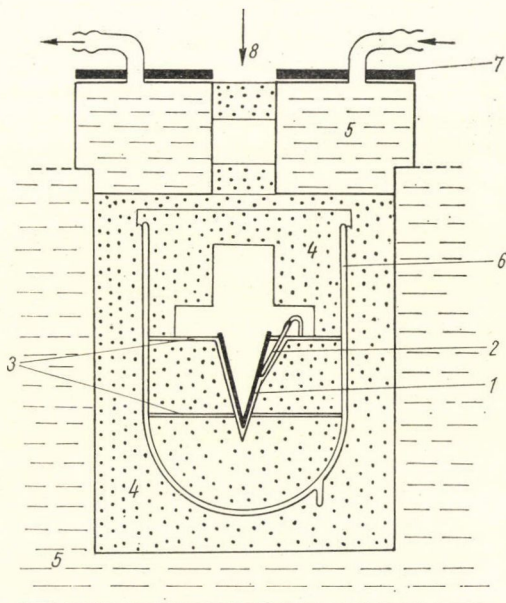
3. A sugárzó energia mérése a reaktor mezejében

Az atomreaktorokban besugárzott anyagminta által abszorbeált sugárzásmennyiség meghatározását is sikeresen meg lehet oldani az erre a célra szerkesztett kaloriméterekkel. *A. R. Anderson* és *R. J. Waite* [22] ír le egy ilyen kalorimétert. A kaloriméter adiabatikus típusú, abszorbense a besugárzott anyag mintája. A kaloriméter sémája a 8. ábrán látható.

Az *A* vizsgált anyag 1,27 cm átmérőjű, 2,54 cm hosszú hengeres kis minta, amely *n* nylon-szálakra van felfüggesztve *B*, *C*, *D* adiabtikus Al-köpenyekben. Az egész rendszer az *E* kvarcüvegben van elhelyezve, melyet mérés idején vákuum alatt tartanak. (Az Al és a kvarc a reaktor sugárzásával szemben igen stabil.) Mérés alatt a *C* és *D* Al-köpeny falai között a köpeny hőmérsékletét fűtőtekercs segítségével $\pm 0,025^\circ\text{C}$ pontossággal ugyanazon a hőmérsékleten tartják, mint a mintáé. A minta és a köpeny közötti hőmérsékletkülönbséget az *a* és *b* termoelemek mutatják. A minta hőmérsékletét a *c* termoelemmel mérik a besugárzáskor vagy az elektromos melegítés útján való hitelesítéskor. Az egész kaloriméter speciális tartóoszlopon van, amely lehetővé teszi a reaktor megfelelő csatornájában a reprodukálható elhelyezést. A kaloriméterből az elektromos vezetékek és vákuumszővek egészen a reaktor kezelő asztalához vezetnek.



8. ábra. A reaktor sugárzó energiájának mérésére szolgáló kaloriméter. *A* — a vizsgált anyag mintája; *B*, *C*, *D* — adiabtikus Al-köpenyek; *E* — kvarc üvegből készült külső köpeny; *F* — elszívócső; *G* — cső az elektromos kivezetéseknek; *a*, *b*, *c* — termoelemek; *n* — felfüggesztő szál



9. ábra. Mikrokaloriméter röntgensugárzás mérésére. 1 — ólomkúp abszorbens; 2 — termisztor; 3 — az abszorbenst tartó plexiüvegkörlapok; 4 — polistyrol-hab hőszigetelő; 5 — ultratermosztát vize; 6 — Dewar-edény; 7 — ólomblende; 8 — a sugárnyaláb iránya

Ezzel a kaloriméterrel 2%-os pontossággal mérték meg különböző anyagmintákban az abszorbeált energiát.

Az atomreaktorok sugárzó energiájának mérésére szerkesztettek kalorimétereket szovjet [23] és jugoszláv [24] kutatók is.

A kalorimetrikus dózismérésről és mikrokaloriméterekről írt összefoglaló cikket az utóbbi időben Z. Kovář [25] és S. R. Gunn [26] is.

Magyarországon is készítettek régebben (*Császár Elemér*) és az utóbbi években is kalorimétereket mérések és kutatások céljára. Mostanában többek között a Központi Kémiai Kutató Intézetben röntgensugárzás mérésére, az Országos Mérésügyi Hivatalban radioaktív preparátumok hitelesítésére, a Központi Fizikai Kutató Intézetben pedig reaktor sugárzásának mérésére szerkesztettek mikrokalorimétert.

Debrecenben, az Alkalmazott Fizikai Intézetben is készült mikrokaloriméter 80–150 keV energiájú röntgensugárzás energiafluxusának meghatározására [27]. A készülék rajza a 9. ábrán látható.

A röntgensugárzást egy ultratermosztátban elhelyezett, ólomlemezből készített kúppalásttal nyelették el, amely egyszersmind felfogta a szórt röntgensugarak nagy részét is. Az ólomlemez felmelegedését termisztorral határozták meg a termisztor ellenállásának egyenáramú Wheatstone-hídban való mérése útján. Az ólomkúp hőkapacitását a kúppalástban elhelyezett fűtőtekercsbe táplált ismert elektromos energia Joule-hője által mérték, és ezáltal hitelesíthették a kalorimétert a röntgensugárzás energiájának abszolút mérésére.

A mikrokaloriméterrel vizsgálták a magyar gyártmányú „Liliput 120” röntgenkészülék röntgensugárzásának energiafluxusát 103 kV csőfeszültségnél kalorimetrikusan, és ugyanabban a fókusz távolságban megmérték Siemens-féle dózismérővel a légdózisteljesítményt r/min egységekben. A mérések szerint az egy r-egységre eső röntgen-energiafluxus $1000 \text{ erg/cm}^2/\text{r}$.

IRODALOM

1. P. Curie—A. Laborde, *Compt. rend.* 136, 673, 1903.
2. G. J. Hine—G. L. Brownell: *Radiation Dosimetry* (Academic Press, New York, 1956, Second printing, 1958), 411—452.
3. Császár E., *Mat. és Term. Tud. Értesítő* 52, 1, 1935, 55, 342, 1936, 56, 397, 1937.
4. K. K. Aglinzew: *Dosimetrie ionisierender Strahlung* (VEB Deutscher Verl. der Wissenschaften, Berlin, 1961, 2. Aufl.), 264—277.
5. J. G. Bayly, *Canad. J. Res.* 28A, 520, 1950.
6. W. P. Hutchinson—A. G. White, *Nature*, 173, 1238, 1954.
7. J. W. Stout—W. M. Jones, *Phys. Rev.* 71, 582, 1947.
8. C. V. Cannon—G. H. Jenks, *Rev. Sci. Instr.* 21, 236, 1950.
9. K. K. Aglincev—E. A. Cholnova, *Dokladi A. N. SzSzsZR* 98, 357, 1954.
10. K. K. Aglincev—E. A. Cholnova: *Trudi VNIIM* 30/90/, 26, 1957.
11. E. A. Cholnova, *Izv. A. N. SzSzsZR* 25, 257, 1961.
12. I. T. Myers, *Rev. Sci. Instr.* 29, 758, 1958.
13. R. M. Lazo—H. A. Dewhurst—M. Burton, *J. Chem. Phys.* 22, 1370, 1954.
14. P. N. Goodwin, *Radiation Res.* 10, 6, 1959.
15. S. Genna—J. S. Laughlin, *Radiology*, 65, 394, 1955.
16. H. E. Johns—J. P. Bernier—D. V. Cormack, *Nature*, 176, 560, 1955.
17. Z. Kovář, *Čs. Čas. Fys.* 11, 417, 1961.
18. N. G. Afanaszjev—N. G. Sevcenko—G. N. Afanaszjev, *Pribori i techn. exp.* 10 (No. 1), 82, 1965.
19. A. P. Komar—Z. Kovář, *Zs. tehn. fiz.* 31, 116, 1961.
20. Payer K.—Safarik I.—Tari L., *Mérés és Automatika* 9 (No. 3), 93, 1961.
21. Z. Kovář, *Jaderná Energie* 9 (No. 10), 1963.
22. A. R. Anderson—R. J. Waite: A. E. R. E. — C/R 2253, Harwell, 1960.
23. M. B. Fivejskij—J. S. Lazurkin—M. A. Mokulskij, *Atomnaja energija* 9, 4, 321, 1960.
24. B. Radak—V. Markovič, *Intern. J. Appl. Radiation Isotopes* 13, 287, 1962.
25. Z. Kovář, *Jaderná Energie*, 8, 51, 90, (1962).
26. S. R. Gunn, *Nucl. Instr. and Methods* 29, 1, 1964.
27. Orbán Gy.—Hordós M., *Acta Phys. et Chim. Debrecina* (1966) (megjelenés alatt).

KÖNYVISMERTETÉS

B. Grycz: Fourth State of Matter

Physics Paperbacks, No. 3.

Iliffe Books Ltd. London — SNTL Publishers of Technical Literature, Prague, 1966

Az Iliffe angol könyvkiadó cég a Prágai Műszaki Könyvkiadóval karöltve új sorozatot indított, amelyben csak fizikusok bevonásával könnyen hozzáférhető, különösebb nehézség nélkül megérthető tárgyalásban kívánják a tudomány egyes aktuális területeit bemutatni. E sorozat 3. kötete Bronislaw Grycz munkája „Az anyag negyedik halmazállapota” címet viseli. Úgy érezzük, nem kell különösebben méltatni azt a körülményt, hogy a plazmafizika tárgyköre a sorozatban helyet kapott, hiszen ezt mindenki helyesnek tartja. A 120 oldalas kis könyvecske első harmadában a szerző a halmazállapotok elemi atomfizikai leírása során exponálja a negyedik halmazállapot minőségileg új tulajdonságait és mutatja be a plazma elektromos szerkezetének egyes következményeit. A további kb. 50 oldalas részben kerül sor az elemi plazmafizika ismertetésére. A szerző itt kitér a plazmában lefolyó elemi kölcsönhatások (ütközések, szóródások) leírására, a plazma egyszerű kinetikai elméletére, a plazma termikus és elektromos viselkedésére, a gázkisülés egyes kérdéseire, plazma és szilárd testek közös határfelületén lejátszódó egyes folyamatok ismertetésére, a plazmadiagnosztika módszereinek bemutatására. A harmadik részben, mintegy 30 oldalon a plazmafizika alkalmazási területeit mutatja be, a plazmák asztrofizikai szerepétől, a különböző plazmaégőkön és magnetohidrodinamikai berendezéseken keresztül a vezérelt termonukleáris folyamatokra vonatkozó kutatásokig.

A fent felsorolt kérdések is mutatják, hogy a Szerző és a Kiadó célkitűzése nem az, hogy a modern kutatás egy-egy szűkebb területen adjon kimerítő, gyors, az éppen most folyó kutatómunkába való bekapcsolódást elősegítő áttekintést. Az a körülmény, hogy a Szerző kifejezetten kerüli a differenciálszámítás igénybevételét a törvényszerűségek megfogalmazásánál, talán éppen arra enged következtetni, hogy szakközépiskolák tanulóinak és elsőéves egyetemi hallgatóknak kíván a Szerző képet adni a sokat emlegetett plazmafizikai jelenségek szerepéről és a velük foglalkozó tudomány módszereiről. A könyvecske értékét mi is ebben látjuk. Az irodalomban ismert korábbi, hasonló jellegű könyvektől (pl. Amasa S. Bishop: „The Sherwood Project”, F. Kammenyckij: „Az anyag negyedik halmazállapota”, vagy L. Artsimovich: „Physique élémentaire des plasmas” c. művektől) Bronislaw Grycz munkáját nem annyira a tárgyalás mélysége, mint inkább az érintett kérdések szélesebb köre különbözteti meg.

Abonyi Iván

Milan Marvan: Negative Absolute Temperatures

Physics Paperbacks No 4.

Iliffe Books Ltd. London — SNTL Publishers of Technical Literature, Prague, 1966

Az Iliffe angol és a Prágai Műszaki Könyvkiadó közös fizikai könyvsorozatának negyedik kötete Milan Marvan munkája, „Negatív abszolút hőmérsékletek” címmel.

E. M. Purcell és R. V. Pound 1951-ben tett felfedezése — olyan rendszerek megfigyelése, amelyekhez negatív abszolút hőmérséklet tartozik — nemcsak a maser és laser fizikája területén, hanem bizonyos értelemben a termodinamika területén is jelentős fejlődést váltott ki. A szerző 60 oldalon megkísérli, hogy elemi eszközökkel (differenciálszámítás alkalmazása nélkül) megmutassa olvasóinak az abszolút hőmérséklet és a rendezetlenség kapcsolatát. Az abszolút hőmérséklet szokásos termodinamikai értelmezésének bemutatása után a spinrendszereket a spinrendszer energiaszintjeinek betöltöttsége és a hőmérséklet közti kapcsolatot vizsgálja. Mintegy 20 oldal marad arra, hogy a negatív abszolút hőmérséklet fellépte által a termodinamika törvényeiben megkívánt módosításokat ismertesse.

A könyvecske kiváló szolgálatokat fog tenni olyan fiataljainknak, akik az érettségi után a fizika egyes fejezeteinek aktuális tárgyköréből és módszereiről kívánnak tájékozódni.

Abonyi Iván

A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MECHANIZMUSÁNAK VIZSGÁLATA FELÜLETENCENTRÁLT KÖBÖS FÉMEKEN

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Kísérleti Fizikai Tanszék

Felületcentrálalt köbös, polikristályos fémek képlékeny alakváltozásának mechanizmusát tárgyaljuk csavarási deformáció során végzett mérések alapján. A dolgozat célja a csavarási deformáció módszerének kiépítése, a módszerrel nyerhető kísérleti eredmények ismertetése, valamint ezek értelmezése. Elméleti és kísérleti eredmények alapján egyszerű egyenletet adunk meg a folyási feszültség és diszlokációsűrűség között, amely az alakítási keményedés II. és III. szakaszára egyaránt érvényes. Megmutatjuk, hogy nagy deformációk esetén ($\gamma > 0,8$) az alakítási keményedés folyamatában egy IV. szakasz jelenik meg, amelyet eddig az irodalomban nem figyeltek meg. Végül becslést adunk a diszlokációk által okozott fajlagos ellenállásváltozásra Cu, Ag, Au és Al esetén.

Bevezetés

A dolgozat polikristályos, felületcentrálalt köbös fémek (Cu, Ag, Au, Al) képlékeny alakváltozásának mechanizmusát tárgyalja. A vizsgálatok alapját az elmúlt évek során az Intézetünkben végzett elektromos ellenállás, valamint folyási feszültség-deformáció összefüggés mérések képezik. Az irodalomból ismeretes elektromos ellenállásmérések eddig csak kevésbé járultak hozzá a képlékeny alakváltozás mechanizmusának megértéséhez. *Nabarro* és munkatársai írják az 1964-ben megjelent "The Plasticity of Pure Single Crystals" c. összefoglaló cikkükben ([14] 231. oldal): "It seems that resistivity measurements, while posing interesting problems, can at present add little to our knowledge of the details of the work hardening process." Jelen dolgozat célja annak megmutatása, hogy szisztematikus ellenállás mérések igen értékes felvilágosításokat nyújthatnak az alakítási keményedés folyamatáról.

Vizsgálatainkban csavarási deformációt alkalmaztunk. A deformációnak ez a módja hátrányosnak tűnhet abból a szempontból, hogy a deformáció inhomogenitása miatt az eredmények interpretálása általában nehezebb, mint pl. tiszta nyújtás esetén. Ezen hátrány mellett azonban számos előnyös vonása is van. A fellépő deformáció tiszta nyírás, s ezáltal remélhető, hogy a polikristályokon végzett vizsgálatokkor az egykristály sajátságok karakterisztikusabban jelentkeznek, mint a tiszta nyújtás estén. Ez utóbbinál ugyanis a külső erő hatására az anyagban hidrosztatikai feszültségek is fellépnek, amelyek szerepe az alakváltozás folyamatában csak kevésbé tisztázott. A csavarási deformáció legnagyobb előnye azonban az, hogy a nyújtáshoz képest lényegesen nagyobb deformációk érhetők el az anyag törése előtt. Ezáltal olyan nagy deformációk hatása is vizsgálhatóvá válik, amelyek egykristályok tiszta nyírási deformációjakor sem érhetők el. Ennek eredménye

* Érkezett 1966. jún. 15.

pl. az, hogy vizsgálataink az alakváltozási folyamat egy olyan szakaszának létezését mutatják, amelyet az irodalomban eddig még nem figyeltek meg (5. fejezet).

A dolgozatban foglalt eredmények nagy részét már közöltük az irodalomban [18, 24, 27]. A jelen összefoglalásnak kettős célja van. Az egyik az, hogy a csavarási deformáció említett hátránya miatt kellő részletességgel körvonalazza és megalapozza azokat a körülményeket, amelyekre vizsgálatainkat felépítjük. Ezt a célt szolgálják az 1., 2., 3. és 4. fejezetek. A dolgozat másik célja az, hogy összes eddigi vizsgálatainkat egységes megvilágításba helyezze. Bár ennek alapjai is fellelhetők már az említett cikkekben, talán mégis mondható az, hogy a 2.3. pontban kifejtett elméleti megfontolások alkalmazása a 4., 5. és 6. fejezetben ismertetett kísérleti eredményekre, ez utóbbiakat egységes képbe foglalja. Ennek következményeként a 7. fejezetben egyszerű egyenletet tudunk megadni a folyási feszültség és a diszlokáció sűrűség között, amely az alakítási keményedés II. és III. szakaszára egyaránt érvényes. Ebből értelmezni tudjuk az alakítási keményedés III. szakaszát, amelyre elfogadható elmélet az irodalomban eddig nem ismeretes. Végül eredményeink lehetőséget nyújtanak arra, hogy a vizsgált fémekre meghatározzuk a diszlokációk fajlagos ellenállását.

Tekintve, hogy vizsgálataink nagy részben elektromos ellenállás méréseken alapszanak, talán a fentiekben vázolt következtetések elegendők ahhoz, hogy az idézett mondatot időszerűtlenné tegyék.

1. A deformálható kontinuumok néhány tulajdonsága

A szilárd testek alakváltozásainak fenomenológiai leírásakor folytonos anyageloszlást tételezünk fel. Ebben a fejezetben az ilyen folytonos anyageloszlású kontinuumok alakváltozásaira vonatkozó — a dolgozatban felhasználásra kerülő — néhány összefüggést foglalunk össze.

1.1. Körkeresztmetszetű hengeres test rugalmas csavarása

Vizsgáljuk meg röviden egy rugalmasan megcsavart henger egyensúlyi viszonyait arra a — szokásosnál kissé általánosabb esetre —, amikor a rugalmassági modulusz változik a henger sugara mentén, azaz $\mu = \mu(r)$. Az eredmény alapját képezi a feszültség-deformáció összefüggés vizsgálatának (3. 3. pont).

Válasszuk az l hosszúságú henger tengelyét koordinátarendszerünk z tengelyéül. Legyen a hosszegységre eső rugalmas elcsavarodási szög a henger r sugarú helyén

$\Phi(r) = \frac{\varphi(r)}{l}$, amely — μ változása miatt — nem feltétlenül állandó a sugár mentén.

Hengerkoordinátákban az egyetlen el nem tűnő feszültségkomponens ekkor $\sigma_{\varphi z}(r)$. Ezzel az egyensúlyhoz szükséges külső forgatónyomaték nagyságára a következő kifejezést kapjuk

$$M_{\text{rug}} = 2\pi \int_0^a \sigma_{\varphi z} r^2 dr, \quad (1)$$

ahol „ a ” a henger külső sugara. Az egyensúly részletes vizsgálatával megmutatható [1], hogy a $\mu(r)\varphi(r)$ mennyiség a henger sugara mentén állandó, és így $\sigma_{\varphi z}$ arányos

r -rel, az állandó rugalmassági modulusz esetéhez hasonlóan. Ezért (1) a következő alakban is felírható

$$M_{\text{rug}} = 2\pi \frac{\sigma_{\varphi z}}{r} \int_0^a r^3 dr.$$

Ebből az r helyen működő feszültség és a külső forgatónyomaték közötti kapcsolatra a következő kifejezés adódik

$$\sigma_{\varphi z}(r) = \tau_{\text{rug}}(r) = \mu(a) \varphi(a) \cdot r = \frac{2M_{\text{rug}}}{\pi a^4} r, \quad (2)$$

függetlenül a rugalmassági modulusz sugárfüggésétől.

1. 2. A képlékeny testek néhány tulajdonsága

A rugalmas deformációk elvi szempontból sokkal egyszerűbbek bármilyen alakváltozásnál. Ennek az az oka, hogy a deformációk és az ezeket előidéző feszültségek közötti összefüggések ebben az esetben időtől függetlenek. Ez a tény a deformáció folyamatának vizsgálatát nagymértékben leegyszerűsíti, mert bármely időpillanatban a feszültségek és a deformációk között ugyanazon összefüggés áll fenn. Azt is lehet mondani, hogy a feszültségek csak az anyag kezdeti állapotától való eltérésnek a függvényei. Ezt úgy szokták kifejezni, hogy az ideálisan rugalmas test „emlékszik” a kezdeti állapotára [2].

Maradó alakváltozások kialakulásakor a helyzet lényegesen bonyolultabbá válik. Az alakváltozás folyamata során a deformációk és a feszültségek között időtől függő kapcsolat van. A folyás megindításához szükséges feszültségek a deformáció sebességétől is függenek a maradó alakváltozás során, ezért a testek már nem „emlékeznek” a kezdeti állapotukra. A feszültségek és deformációk általános kapcsolata még a legegyszerűbb esetben (ideálisan plasztikus test) sem ismeretesek. A keményedő anyagok — tehát a reális testek — plaszticitásának elmélete pedig csak kezdeti eredményekre vezetett az eddigiek során.

A képlékeny anyagok deformációjának általános leírását nagymértékben nehezíti továbbá, hogy az alakváltozás kezdeti szakaszában a plasztikus folyás feltételei általában az anyagnak csak egy részére teljesülnek. Ezért a deformáció teljes leírása megköveteli a rugalmas és képlékeny tartományokban kialakuló feszültségterek olyan meghatározását, hogy a határokon ezek folytonosak legyenek. További nehézségeket jelent az is, hogy egy deformált minta tehermentesítése utáni újratelheléskor a kialakuló deformációk és feszültségek közötti időfüggő kapcsolat is általában megváltozik. Más szóval a deformáció lefolyása függ a minta előzetes deformációjától vagy előéletétől.

Az említett problémák teszik indokolttá, hogy sok esetben olyan idealizált anyagok tulajdonságait vizsgáljuk, amelyek a gyakorlatban nem léteznek ugyan, de számos fontos fogalom kialakulásához vezethetnek. A következőkben röviden áttekintjük a képlékeny anyagok néhány sajátosságát. A legegyszerűbb esetet az ún. tökéletesen képlékeny test képezi. Bizonyos határig ez az anyag követi a Hooke-törvényt, majd az ún. folyási feszültségen állandó sebességgel végbemenő alakváltozás lép fel. Hangsúlyozni kell, hogy újratelheléskor az alakváltozás és a feszültség között ugyanolyan összefüggést tételezünk fel, mint a még csak rugalmasan deformált anyagokra.

1.3. Folyási feltételek

A képlékeny anyagok alakváltozásának leírásához elsősorban az ún. folyási feltételeket kell megállapítanunk. Ez azon terhelés megadását jelenti, amelyen a folyás megindul. A folyási feszültséget az anyag rugalmas deformációkon keresztül éri el, ahol a deformációk egyértelmű összefüggésben vannak a feszültségekkel. Ezért a képlékeny folyás megindulásának feltétele megadható egy, a feszültségek között fennálló összefüggéssel; azaz a folyás feltétele a következő alakú kell legyen:

$$f(\sigma_{ik}) = 0. \quad (3)$$

Ha izotróp anyagokra szorítkozunk, akkor a feszültség komponensek nem függenek a koordináta-rendszer helyzetétől, azaz a (3) folyási feltétel változatlan kell maradjon a koordináta-rendszer megváltozásakor. Ebből következik, hogy a (3) összefüggés a feszültség tenzor egy invariánsa kell legyen. További egyszerűsítést tesz lehetővé az a tapasztalati tény [3], hogy hidrosztatikus feszültségek nem vesznek részt a folyási feszültségek kialakításában. Ez kifejezhető még úgy, hogy a (3) feltétel a feszültségdeviátor egy invariánsa kell legyen. A feszültségdeviátor definíciója a következő:

$$S_{ik} = \sigma_{ik} - \frac{1}{3} \sum_{l=1}^3 \sigma_{ll} \cdot \delta_{ik}. \quad (4)$$

Ismeretes továbbá, hogy egy tenzor alapinvariánsai a következők:

$$I_1 = \sum_{l=1}^3 S_{ll}; \quad I_2 = \sum_{i,k=1}^3 S_{ik} S_{ik}; \quad I_3 = \sum_{i,j,k=1}^3 S_{ij} S_{jk} S_{ki}. \quad (5)$$

Ezek közül az I_1 definíció szerint nulla. A legegyszerűbb és általánosan használt folyási feltétel von Misestől származik [4]:

$$\frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^3 S_{ik} S_{ik} = \tau^2, \quad (6)$$

ahol τ a tiszta nyírás folyáshatára. Tiszta nyíráskor ugyanis a koordináta-rendszer megválasztható úgy, hogy az egyetlen el nem tűnő feszültségkomponens pl. τ_{xy} . Ekkor a (6) folyási feltétel szerint τ_{xy} abszolút értéke τ -val egyenlő. Tiszta z irányú nyújtás esetén (4) felhasználásával (6)-ból

$$\frac{1}{3} \sigma_{zz}^2 = \tau^2$$

adódik. Eszerint az anyag egytengelyű nyújtásakor

$$\sigma_{zz} = \sqrt{3} \tau \quad (7)$$

húzófeszültségen kezd folyni. A (6) folyási feltétel tehát a tiszta nyírásra és nyújtásra kapott folyási feszültségek között a $\sqrt{3}$ faktort eredményezi.

Egy másik, sokszor használt folyási feltételt *Tresca* vezette be [5]. Ezt a következőképpen kaphatjuk meg. Legyenek a feszültségtenzor komponensei főtengety-rendszerben (az ún. főfeszültségek) $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$. Ekkor a

$$\tau_1 = \frac{|\sigma_2 - \sigma_3|}{2}, \text{ stb.} \quad (8)$$

kifejezéseket fő csúsztatófeszültségeknek nevezzük. A *Tresca*-féle folyási feltétel szerint a folyás akkor indul meg, ha a legnagyobb fő csúsztató feszültség értéke eléri a tiszta nyírás folyási feszültségét, azaz

$$\sigma_1 - \sigma_3 = s_1 - s_3 = 2\tau. \quad (9)$$

Egytengelyű, z irányú húzáskor a legnagyobb főfeszültség σ_{zz} , a másik kettő nulla. Két főfeszültség között a legnagyobb különbség tehát σ_{zz} , a (9) folyási feltétel pedig megszabja, hogy egytengelyű húzás σ_{zz} folyási feszültsége és a tiszta nyírás τ folyási feszültsége között az arányossági tényező 2.

A képlékeny anyagok deformációjának leírásához a folyási feltételeken kívül szükséges a deformációk és feszültségek közötti összefüggés ismerete is. A tökéletesen képlékeny, tehát nem keményedő testekre ilyen összefüggések viszonylag egyszerűen megadhatók [3], a keményedő anyagok esetében azonban általános érvényű összefüggés nem ismeretes. Az összes plaszticitási elméletnek van azonban egy közös vonása. A kísérleti tapasztalatok alapján a plasztikus deformáció során bekövetkező térfogatváltozás jó közelítéssel nullának vehető. Ezért valamennyi képlékenységi elméletben feltételezik, hogy az alakváltozás képlékeny részére

$$\sum_{i=1}^3 \epsilon'_{ii} = 0. \quad (10)$$

A következőkben — mielőtt a keményedő anyagok plasztikus tulajdonságait megvizsgáljuk — a szilárd testek maradó alakváltozásának mikromechanizmusát tekintjük át.

2. Reális anyagok plasztikus deformációja, kristályhibák

A reális kristályok képlékeny alakváltozása lényeges különbséget mutat minden idealizált tulajdonságú anyaghoz képest. Ennek elsősorban az az oka, hogy a reális, tehát kristályos szilárd testek maradó alakváltozása egy kristályhiba, a diszlokáció létezésével van szoros kapcsolatban. A deformáció folyamata továbbá nagyszámú, különböző típusú rácshiba keletkezésével függ össze, s ezek együttes hatása szabja meg a kristály sajátos makroszkópikus viselkedését.

A jelen fejezetben a kristályhibákkal kapcsolatos alapvető fogalmakat tekintjük át a teljességre való törekvés nélkül. A kristályhibák fogalmának tisztázásához a tökéletes kristály tulajdonságaiból kell elindulnunk.

Tökéletesnek nevezzük egy kristályt, ha minden atomja az adott szerkezet által meghatározott rácspontban helyezkedik el. Ilyen ideális tulajdonságú kristály a valóságban nem létezik. Számos fizikai folyamat és hatás eredményeként a valódi vagy reális kristályok mindig nagyszámú hibát tartalmaznak. Ezeknek a hibáknak a jelenléte a kristály makroszkópikus tulajdonságait alapvetően befolyásolja. A hibák

létezésének felismeréséhez sokféle fizikai tulajdonság vizsgálata révén eljuthatunk. A következőkben a kristályok képlékeny tulajdonságainak megértéséhez szükséges rács hibák sajátságait foglaljuk röviden össze.

2.1. A kristályhibák fogalma

A valódi kristályokban az atomok elrendeződése nem mindenütt tökéletes. A tökéletes elrendeződéstől való bármilyen eltérést kristályhibának vagy rács hibának nevezünk. Minden rács hiba körül olyan kicsiny tartomány alakul ki, ahol az atomok szabályos rendje megszűnik, és bizonyos atomok körüli szomszédok elhelyezkedése eltérő lesz az ideáltól. Minden hiba sajátos atomkonfigurációt alakít ki maga körül.

A hibák leírásának direkt útja az lehetne, hogy megadnánk minden atomnak az ideális helyzettől való eltérését. Ezen általában járhatatlan út helyett célszerű a hibák hatását bizonyos jellegzetes tulajdonságaik alapján jellemeznünk, amelyek ismeretében az anyag sajátságaiban fellépő változások meghatározhatók anélkül, hogy ténylegesen ismernénk minden atom pontos helyzetét. Más szóval bármely rács hiba fogalmával nagy számú atom helyzetének rövid jellemzését kívánjuk megadni.

2.2. Pont hibák a kristályban

Az alapanyagétól eltérő tulajdonságú idegen atomok beépülése a kristályba is pontszerű hibák fellépését eredményezi. Az ilyen kémiai jellegű szennyezések szerepét most nem tárgyaljuk, csak a kristály atomjainak rendellenes elhelyezkedéséből adódó hibákat vizsgáljuk.

Pont hibák általában úgy keletkeznek, hogy a kristályok atomjainak egy része a hőmozgás vagy egyéb hatások következtében kimozdul eredeti helyzetéből, üres rács helyet (vakanciát) hagyva maga után és a kristályszemcse felületén, vagy a többi atom közé beékelődve rács közti (intersticiális) atomként helyezkedik el.

Ezeknek a hibáknak nemcsak a termikus egyensúly beállításában van fontos szerepük, hanem a képlékeny alakváltozás folyamatára is jelentős hatásuk van. Tekintve, hogy ezen hibák tulajdonságai ma már az alapismeretek közé tartoznak, ezért ezekkel nem foglalkozunk.

2.3. Reális testek képlékeny alakítása

A különböző testek plasztikus deformációjának makroszkopikus leírására szinte kizárólag kontinuum elméletek ismeretesek. A valódi, tehát kristályos testek maradékalakváltozásának megértése azonban csak a kristályszerkezet figyelembevételével lehetséges. Ez a kijelentés talán ellentmondásnak tűnik az előző mondat tartalmával. Ez azonban csak látszólagos. Bizonyos szempontból a kontinuum elmélet általánosabbnak tekinthető a kristályszerkezetek fizikájánál. Nagyszámú makroszkopikus jelenség *leírásakor* ugyanis az anyag valóban kontinuumnak tekinthető, s ez éppen nem valamilyen speciális feltevést, hanem semmiféle megszorítást nem jelent az anyag szerkezetére vonatkozóan. Emiatt a kontinuum elmélet eredményei bármilyen szerkezetű testre alkalmazhatók (amikor a kontinuum elmélet közelítés megengedett), szemben a struktúrát figyelembe vevő elméletekkel, amelyek mindig csak a vizsgált szerkezetű anyagokra érvényesek.

Természetesen azonban, hogy mihelyt olyan mikrojelenségeket akarunk megérteni, ahol az anyag szerkezeti tulajdonságai dominálnak, az utóbbiakból kell kiindulnunk. A reális anyagok alakváltozásának mechanizmusa pedig tipikusan atomi folyamatokra vezethető vissza. Ha tehát nemcsak az atomi folyamatok makroszkopikus eredményét akarjuk leírni, hanem éppen ezen folyamatok mibenlétét kívánjuk megismerni, úgy ez csak a kristályszerkezet figyelembevételével érhető el.

A következőkben röviden áttekintjük a kristályok néhány sajátosságát, amelyek a képlékeny alakváltozás kialakításában alapvető szerepet játszó kristályhibák, a diszlokációk felismeréséhez vezetnek.

2.3.1. Egykristályok alakváltozása

Egykristályok homogén feszültség hatására kialakuló maradó alakváltozása rendszerint jól definiált kristálytani síkokban és kristálytani irányokban megy végbe. Ezen kristálytani síkok rendszerét csúszási rendszernek nevezzük. A kristályokban általában több, egyenértékű csúszási rendszer van.

Ha pl. henger alakú egykristályt növekvő σ tengelymenti feszültséggel terhelünk, a képlékeny alakváltozás jól definiált σ érték elérésekor indul meg. Azt a feszültséget, amely ekkor az elsőnek aktiválódó csúszási rendszerben a csúszás irányában hat, kritikus csúsztató feszültségnek (critical resolved shear stress) nevezzük. Ez a feszültség az anyag jellemző paramétere (Schmid-törvény [6]), s a tengely menti σ feszültséggel a következőképpen függ össze (1. ábra)

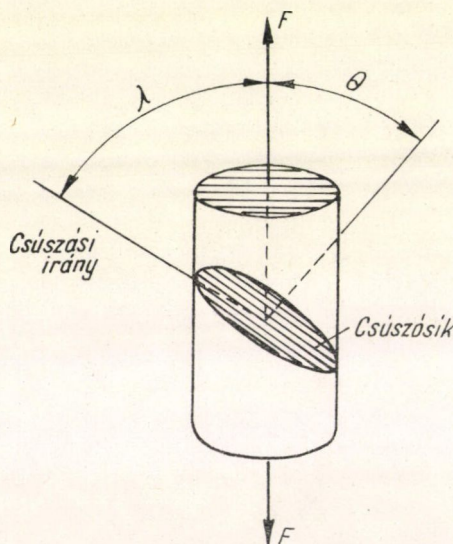
$$\tau_r = \cos \Theta \cdot \cos \lambda \cdot \sigma = \frac{1}{m} \sigma. \quad (11)$$

A képlékeny alakváltozás növekedésével további deformáció kialakításához a σ külső feszültség növelésére van szükség. Ezt a jelenséget nevezik alakítási keménységnek, amely a feszültség-deformáció görbével, a

$$\tau_r = \tau_r(\gamma) \quad (12)$$

összefüggéssel jellemezhető.

Azt a legkisebb külső feszültséget, amelyen egy jól hőkezelt anyag maradó alakváltozása tiszta nyírásakor először bekövetkezik, folyáshatárnak vagy kritikus nyírási feszültségnek nevezzük. A tapasztalat szerint az egykristályok folyáshatára $10^{-4} \mu - 10^{-5} \mu$, ahol μ a rugalmassági modulusz.



1. ábra. A kritikus csúsztató feszültség meghatározásához

2. 3. 2. A tökéletes kristály képlékeny alakváltozása

A tökéletes kristály maradó alakváltozása nem homogén nyírás által megy végbe, hanem egyes atomsíkok csúsznak el egymás mentén, kártyalapok egymáson való elcsúszásához hasonlóan. Azokat a síkokat, amelyek mentén a csúszás fellép, csúszási síkoknak nevezzük. Az elcsúszás irányát és nagyságát megadó vektor a csúszás vektor.

Ha megkíséreljük a kristályos anyagoknak az előbbi pontban említett tulajdonságait leírni a tökéletes kristály modelljével, akkor számos ellentmondásra jutunk [7]. Világos például, hogy a csúszás nagyságát azonosnak kell feltételeznünk a különböző párhuzamos csúszási síkok mentén, mert tökéletes kristály esetén egyetlen sík sincs kitüntetve a többihez képest. Ez azonban ellentmond a tapasztalatnak, mert az egykristályok alakváltozásakor mindig találunk kitüntetett csúszási síkokat, amelyek mentén az elcsúszás lényegesen nagyobb a többihez képest.

Még nagyobb ellentmondást találunk, ha a tökéletes kristály modellje alapján akarjuk a képlékeny alakváltozás megindításához szükséges kritikus nyírási feszültséget meghatározni. *Frenkel* nagyon egyszerű modell alapján erre a feszültségre a következő kifejezést kapta [8]:

$$\tau_{kr} = \frac{\mu}{2\pi}$$

ahol μ a rugalmassági modulusz. Ez több nagyságrend eltérést jelent a tapasztalathoz képest. Az eltérés nem abból származik, hogy a *Frenkel* által alkalmazott egyszerű modell hibás, hiszen *Mackenzie* [9] pontos számításaiból is a tökéletes kristály kritikus nyírási feszültségére $\sim \mu/30$ adódott, ami még mindig sokkal nagyobb a tapasztalati értékeknél.

Az említett ellentmondások nyilvánvalóan abból származnak, hogy a valódi kristályok nem lehetnek tökéletesek, hanem kell tartalmazzanak olyan rendellenességeket, amelyek a képlékeny alakváltozás mechanizmusában alapvető szerepet játszanak. A következőkben ezen hibák sajátosságait vizsgáljuk meg röviden.

2. 3. 3. A diszlokációk és a képlékeny alakváltozás mechanizmusa

A kristályos testek képlékeny alakváltozása nagy mértékben inhomogén és anizotróp. Ez, valamint az előzőkben említett jelenségek a tapasztalattal egyezésben a diszlokáció elmélet segítségével értelmezhetők. A diszlokáció elmélet alapját az képezi, hogy a csúszás lokális folyamat, és a képlékeny alakváltozás bizonyos elcsúszott tartományok fokozatos kiterjedése révén, nem pedig a csúszási síkok egyidejű és homogén elcsúszásával megy végbe. Ebből pedig nyilvánvaló, hogy kell a csúszósíkban létezniük bizonyos határoknak, amelyek a már elcsúszott és a még el nem csúszott tartományokat egymástól elválasztják. Ezeket a határokat nevezzük diszlokációknak, és a csúszási folyamatot (az elcsúszott tartományok kiterjedését) a diszlokációk mozgásának.

Amikor az elcsúszott és el nem csúszott tartományok határa a csúszási síkban merőleges a csúszás irányára, *éldiszlokációról* beszélünk [7].

Ha az elcsúszott tartomány határvonala párhuzamos a csúszás irányával, *csavardiszlokációról* beszélünk [7].

A csúszósíkban a diszlokációk mentén az atomok kicsiny rugalmas nyírástól eltekintve szabályosan kapcsolódnak össze. Ez annak következménye, hogy az ún. teljes diszlokációkhoz tartozó csúszásvektor éppen egyenlő a rács translációs vektorával [7]. Ezért a diszlokáció vonalmenti rendezetlenséget eredményez a kristályban, s emiatt szokás diszlokációvonalról beszélni.

Természetesen az él- és csavardiszlokáció csak igen speciális esetet képez. Általában a diszlokáció alakja tetszőleges lehet. Megmutatható, hogy tetszőleges görbe mentén fekvő diszlokáció létrehozható valamely felület mentén végzett alkalmas csúszással [10]. Az így adódó diszlokáció tulajdonságai csak a görbe alakjától és a diszlokáció vonal mentén állandó csúszásvektortól, vagy Brugers vektortól függenek.

A kristály atomi felépítését tekintve egy adott diszlokációhoz rendelhető legáltalánosabb felület is csúszási síkok részeiből tevődik össze, amelyek a közös csúszásvektorral párhuzamos egyenes szakaszok mentén metszik egymást. Ezért bármely diszlokáció egyenes szakaszokból tehető össze, amelyek hossza esetleg csak néhány atomtávolság lehet. Az ilyen rövid, a diszlokációvonalban törést előidéző diszlokáció szakaszokat könyököknek (kink) vagy lépcsőknek (jog) nevezzük aszerint, hogy benne fekszenek-e az eredeti diszlokáció csúszási síkjában vagy nem.

A diszlokáció olyan konfigurációja az atomoknak, amely mozoghat a kristályon keresztül. A valódi kristályok maradó alakváltozása a diszlokációk mozgásával írható le. A „diszlokáció mozgás” kifejezés kényelmes leírási módja nagyszámú atom mozgásának; mindegyik atom az atomtávolság tört részével mozdul el, amikor a diszlokációt képező atomkonfiguráció egy atomtávolsággal elmozdul. A diszlokáció mozoghat a csúszósíkja mentén vagy erre merőlegesen. A csúszósíkban vagy csúszási felületen való mozgást csúszásnak (glide, slip), a csúszósíkra merőleges mozgást kúszásnak (climb) nevezzük.

A diszlokáció mozgása az atomoknak csak csekély mértékű átrendeződésével jár együtt, ezért a diszlokáció igen könnyen mozoghat. Ez magyarázza azt a tapasztalati tényt, hogy a reális (tehát diszlokációt tartalmazó) kristály már sok nagyságrenddel kisebb feszültségen szenved maradó alakváltozást, mint azt elméletileg az ideális kristályra várni lehetne.

A diszlokáció fogalmának ismeretében valamely külső feszültség alakváltoztató hatását úgy is kifejezhetjük, hogy a külső feszültség a diszlokációra erőhatást fejt ki. Mivel azonban a tényleges erők az atomokon működnek (és nem azon az atomkonfiguráción, amit a diszlokáció fogalmával jellemezünk), ezért a diszlokációra ható erőnek a fogalma természetesen különbözik a newtoni erőfogalomtól. Ha a csúszósíkban a csúszás irányában τ feszültség hat, akkor a diszlokációra ható erő (a diszlokáció vonalra merőlegesen)

$$F = \tau b, \quad (13)$$

ahol b a Burgers vektor abszolút értéke. Ezen összefüggés alapján a kritikus csúsztató feszültséget úgy értelmezhetjük, hogy annak alkalmazásakor a diszlokációkra ható erő eléri a mozgathatósághoz szükséges értéket.

A diszlokációk kúszó mozgásához szükséges erő lényegesen nagyobb, mint csúszás esetén, mert a kúszómozgás szükségképpen pont hibák, intersticiális atomok vagy vakanciák keletkezésével jár együtt. Mivel a képlékeny alakváltozás során az egymást metsző diszlokációkon keletkező lépcsők általában csak kúszással mozoghatnak, ez azt jelenti, hogy a képlékeny alakváltozás folyamatában a disz-

lokációk sokszorozódásán felül [7], nagyszámú különböző ponthiba is keletkezik. Ezen mechanizmusok részletes tárgyalásával azonban itt nem foglalkozhatunk.

Normális feszültségek hatására a diszlokációk csak csúszósíkjukban való mozgást végezhetnek. A lépcsők ezzel egyidejűleg kialakuló kúszómozgása elhanyagolható alakváltozást eredményez. Ebből következik, hogy a kristályos testek képlékeny alakváltozása tiszta nyírásként fogható fel. Amennyiben nem a deformált test alakjának megváltozását akarjuk megadni, hanem az egy vagy több lépésből álló alakváltozási folyamat során keletkező hibákra akarunk felvilágosítást kapni, akkor nyilvánvalóan a diszlokációk mozgása során bekövetkezett összes nyírást kell megadnunk, függetlenül a tényleges makroszkopikus alakváltozástól. Ennek a megállapításnak a 3. 2. pontban lesz lényeges szerepe.

Ha egy kristályra ható külső feszültség révén a diszlokációra ható erő valamely csúszási síkban eléri a mozgáshoz szükséges értéket, a diszlokáció elmozdulása miatt a kristály maradó alakváltozást szenved. A kristályokban már kialakulásukkor (dermedéskor) sok diszlokáció keletkezik. A tapasztalat szerint azonban a deformáció során további nagyszámú diszlokáció jön létre. Az ilyen folyamatokat diszlokációk sokszorozódásának nevezzük. Ezek részletes vizsgálatával nem foglalkozhatunk, csak azt említjük meg, hogy a sokszorozódás egyik legfontosabb típusa az ún. Frank—Read forrásokkal függ össze [11]. Ezek működése a következő. Ha egy diszlokáció szakasz két végpontja valamilyen módon rögzítve van, akkor külső feszültség hatására a diszlokáció szakasz fokozatosan kihajlik, majd ha a feszültség elég nagy, a rögzített két pontról egy diszlokáció hurok válik le. Ez a hurok tovább tágul, míg az eredeti diszlokáció szakasszal az előbbi folyamat ismétlődik meg. Rögzített pontok különböző csúszási síkban fekvő diszlokációk találkozásakor (csomópontok), továbbá szennyező atomok vagy lépcsők rögzítő hatásaként keletkezhetnek [7].

Megmutatható, hogy a Frank—Read forrás működéséhez szükséges feszültség nagysága [12]:

$$\tau_F = \alpha_F \frac{\mu b}{l_F}, \quad (14)$$

ahol μ a rugalmassági modulusz, b a diszlokáció szakasz Burgers vektora, l_F a forrás hossza és α_F arányossági tényező (értéke kb. egy).

Ha egy diszlokáció teljesen végighalad a kristály A területű síkján, akkor a kristály ezen sík által elválasztott részei egymáshoz képest b -vel elcsúsznak. Ha a diszlokáció csak δA terület mentén mozdul el, akkor a két rész relatív δu elmozdulása $\delta A/A$ arányban kisebb lesz, tehát

$$\delta u = \frac{\delta A}{A} b. \quad (15)$$

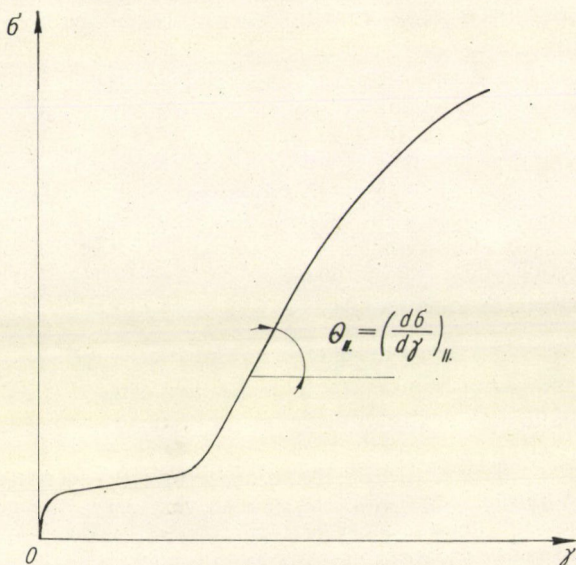
Legyen a diszlokáció sűrűség (a térfogategységben levő diszlokációk összes hossza) N , és az átlagos elmozdulás ds , akkor a nyírási deformáció megváltozása

$$d\gamma = bNds. \quad (16)$$

2. 3. 4. Egykristályok alakítási keményedése

Az alakítási keményedés elmélete a diszlokáció elmélet egyik legfontosabb alkalmazási területét képezi. Az első ilyen elmélet Taylor-tól származik [13]. Bár

Taylor rendkívül leegyszerűsített modellt alkalmazott — amelyet azóta nagyszámú, jóval bonyolultabb elmélet követett — mégis azt mondhatjuk, hogy az alakítási keményedés elméletében *Taylor* óta lényeges előrehaladás nem történt. A rendkívül bonyolult és nagyszámú paraméter értékétől függő folyamat vizsgálatában ezideig



2. ábra. Egykristályok alakítási keményedése

nem sikerült minden tekintetben kielégítő képet nyerni. Különösen megnehezíti ennek elérését az a tény, hogy a tömör anyagra kapott kísérleti eredmények magyarázatakor tett feltevéseket gyakorlatilag szinte semmilyen közvetlen megfigyelés nem támasztja alá. A közvetlen megfigyelésekre — elektronmikroszkópos vizsgálatokra — alapozott elméletek értékét viszont nagy mértékben lecsökkenti az, hogy a vékony, néhány mikron vastag fóliák viselkedése valószínűleg lényeges eltéréseket tartalmaz a tömör anyagokéhoz képest, mivel az ilyen testekben a szabad felületek és a diszlokációk kölcsönhatása már jelentős szerepet játszik. Ez az eltérés még súlyosbodik azzal, hogy az elektronmikroszkópban megfigyelhető hiba szerkezet nemcsak az anyagtól, hanem az előzetes preparálási technikától is függ.

A helyzet természetesen még bonyolultabb polikristályok esetén, ahol a szomszédos kristályszemcsék, továbbá a szemcsehatárok szerepét is figyelembe kell vennünk.

A következőkben nem kívánunk még megközelítő képet sem adni az alakítási keményedés elméletéről, mindössze azokat a fogalmakat szeretnénk összefoglalni, amelyeket a későbbiekben használni fogunk.

A diszlokációk mozgatásához szükséges kritikus csúsztató feszültség az egykristályok alakváltozásának növelésekor szintén nő. A kísérleti eredmények szerint egykristályokra adódó feszültség-deformáció görbét a 2. ábra mutatja felületcentrált köbös fémekre. A görbén három jellegzetes szakaszt különböztethetünk

meg. Az egyes szakaszokra jellemző paraméterek a feszültség irányától, a hőmérséklettől és a szennyezettség mértékétől igen különbözően függenek.

Az I. szakasz a rugalmas alakváltozás után a τ_{kr} kritikus feszültségen kezdődik. Ezt a könnyű csúszás vagy egyszeres csúszás tartományának nevezik. Ez a polikristályos anyagokon gyakorlatilag nem jelenik meg.

A jóval meredekebb II., vagy lineáris szakasz legjellegzetesebb tulajdonsága, hogy a Θ_{II} keményedési sebesség a hőmérséklettől és a szennyezettségtől gyakorlatilag független. Ez azt jelenti, hogy az anyag tulajdonságai a II. szakaszban az előzetes alakváltozás közben kialakult diszlokáció szerkezetétől függenek.

A további alakváltozás során a keményedés sebessége egyre csökken. Ezt a tartományt III., vagy parabolikus szakasznak nevezzük. Ezen szakasz indulási feszültsége, továbbá a mereksége növekvő hőmérséklettel rohamosan csökken. Erre a szakaszra az jellemző még, hogy itt a diszlokációk mozgásukat gyakran egy, az eredetivel párhuzamos hálózati síkon folytatják. Az ilyen diszlokáció mozgást keresztcsúszásnak nevezzük. A keresztcsúszások s ezzel a III. szakasz megindulása az ún. rétegződési hiba energiájától függ. Az alumíniumnál — amelyben a rétegződési hiba energiája nagy — gyakorlatilag már szobahőmérséklet környékén hiányzik a II. szakasz, mert a III. szakasz kezdeti feszültsége olyan kicsi [7].

Az alakítási keményedésre vonatkozó elméletek célja a feszültség-deformáció egyenletének meghatározása. Mint már említettük, az eddigi elméletek még nem vezettek kielégítő eredményre.

Egyszerűen megkaphatjuk azonban azt az összefüggést a feszültség és deformáció között, amelyre az összes, eddig ismeretes modell vezet. Tegyük fel, hogy a diszlokációk mozgatásához szükséges csúsztató feszültség, τ , csak az anyag rugalmassági modulusának (μ), a diszlokációk Burgers vektorának (b) és a diszlokációsűrűségnek (N) a függvénye. Ekkor dimenzionális okok miatt a τ_r/μ hányados csak a $b \cdot N^{1/2}$ függvénye lehet. A diszlokációk elméletéből ismeretes azonban, hogy mind a diszlokációk kölcsönhatásából, mind pedig egy diszlokáció esetén a vonalmenti feszültségtől származó (a diszlokációk mozgását akadályozó) feszültségek a Burgers-vektorral, b -vel arányosak. Ebből következik, hogy a deformáció során fellépő feszültség növekmény a következő alakban adható meg a legegyszerűbben:

$$d\tau_r = \alpha \mu b dN^{1/2} \quad (17)$$

vagy

$$\tau_r = \alpha \mu b N^{1/2}. \quad (17)$$

Valamennyi eddig ismert elmélet lényegében az utóbbi összefüggésre vezet. Az α arányossági tényező értékére a különböző modellekből $1/2$ és $1/7$ közötti érték adódik [14].

A feszültség és deformáció közötti kapcsolat explicit meghatározásához konkrét folyamatokat kell megvizsgálnunk.

A deformáció kezdeti szakaszában a makroszkopikus alakváltozás kialakulásához a diszlokációforrások működése szükséges. A források működéséhez szükséges feszültség azonban nem elegendő általában ahhoz, hogy a forrásokról leszakadó diszlokációhurkokat akadályokon át is mozgatni tudja. Ezért a keletkező diszlokációhurkok különböző akadályokon megakadnak, miután átlagosan l_s szabad úthosszal elmozdultak. A makroszkopikus deformációt a folyamat során keletkező összes diszlokációhurok elmozdulása határozza meg. Legyen a térfogat-

egységenként keletkező diszlokációhurkok száma dn , akkor a megfelelő nyírási deformáció:

$$d\gamma = \alpha_1 l_s^2 dn, \quad (\alpha_1 = \text{áll.}) \quad (18)$$

mert a diszlokációk l_s^2 -tel arányos területet sűrűltak. A diszlokációsűrűség növekedése (az újonnan keletkezett diszlokációk hossza):

$$dN = \beta_1 l_s dn, \quad (\beta_1 = \text{áll.}). \quad (19)$$

Ez utóbbi két egyenletből

$$d\gamma = \beta_2 dN l_s, \quad \left(\beta_2 = \frac{\alpha_1}{\beta_1} \right). \quad (20)$$

Ha most feltesszük még, hogy az átlagos szabad úthossz arányos $(\gamma - \gamma_0)^{-1}$ -nel (γ_0 állandó), akkor a (17) felhasználásával a feszültség és deformáció között a

$$\tau_r \frac{d\tau_r}{d\gamma} = \alpha (\gamma - \gamma_0), \quad (\alpha_0 = \text{áll}) \quad (21)$$

lineáris, tehát a II. szakaszt leíró összefüggést kapjuk. A szabad úthosszra tett feltevés jó egyezésben van elektronmikroszkópos vizsgálatokkal [14].

A deformáció növekedésével az alakváltozás folyamata megváltozik. Az ekkor fellépő III. szakasz tulajdonságai az irodalomban csak kevésbé ismeretesek [14]. Formálisan eljuthatunk azonban a parabolikus összefüggéshez az alábbi megfontolás alapján. Tegyük fel, hogy ebben a szakaszban a diszlokációk elmozdulása során a diszlokációsűrűség megváltozása a már meglevő sűrűséggel arányos, azaz

$$dN = \beta ds \cdot N, \quad (22)$$

ahol β arányossági tényező. Felhasználva még a (16), és (17) egyenleteket, a feszültség és deformáció között az alábbi összefüggésre jutunk:

$$\tau_r \frac{d\tau_r}{d\gamma} = \bar{\alpha}, \quad \left(\bar{\alpha} = \frac{1}{2} \alpha^2 \beta b \mu^2 \right). \quad (23)$$

Megkaptuk tehát a parabolikus összefüggést. Gondolatmenetünk lényegében *Taylor*-éval egyezik meg [13]. Hangsúlyozandó azonban, hogy a (22) összefüggést csak formális feltevés alapján írtuk fel. Figyelembe véve a (16) összefüggést, (22) a sokkal konkrétabb (20)-szal csak akkor egyeztethető össze, ha a III. szakaszban $l_s = \text{konst.}$ -t tételezünk fel, ami igen valószínűtlen eredmény. A III. szakasz diszlokációjára a 7. 1. pontban még visszatérünk.

A fentiekben vázolt általános jellegű megfontolások azt mutatják, hogy ha csak félkvantitatív módon is, de van lehetőség az alakítási keménnyedéssel kapcsolatos kísérleti eredmények értelmezésére. Számszerű összefüggések meghatározásához már speciális modellekre van szükség. Ezek a modellek általában meghatározott diszlokációstruktúrát vesznek számításba, és így számszerű meghatározását teszik lehetővé az előző egyenleteinkben szereplő arányossági tényezőknek [14]. Mivel a tapasztalattal általában megegyezésre vezető modell nem ismeretes, ezért ezekkel nem foglalkozunk, annál is inkább, mert az előző egyenletek már megfelelő kiindulási alapot szolgáltatnak a kísérleti eredmények értékeléséhez.

2. 3. 5. A hibakoncentráció növekedése képlékeny alakítás során

Ha egy diszlokáció a csúszósíkjában mozog, szükségképpen minden olyan diszlokációt metsz, amely áthalad a csúszósíkján. Minden metszés a diszlokáción egy lépcsőt eredményez, amelynek mozgása általában csak ponthiba keletkezéssel együtt valósulhat meg. Az alábbiakban összefüggést állapítunk meg makroszkopikusan mérhető paraméterek és az alakítás során keletkező hibakoncentráció között.

Foglalkozunk először a ponthibák keletkezésével. Tegyük fel, hogy a folyási feszültség $d\tau_r$ -rel való növelésekor dn_f új Frank—Read forrás kezd működni, és a deformáció $d\gamma$ növekedése során mindegyik új forrás n_0 hurkot emittál, amelyek átlagosan A terület mentén mozdulnak el. Ekkor a deformáció növekménye a következőképpen adható meg:

$$d\gamma = n_0 dn_f \cdot bA. \quad (24)$$

Legyen a csúszósíkot metsző diszlokációk átlagos távolsága l_d . A hurkok által metszett diszlokációk száma ekkor

$$N_0 = \frac{(n_0 dn_f) A}{l_d^2} = \frac{d\gamma}{bl_d^2}.$$

A keletkező ponthibák dn_p száma arányos a hurkok által metszett diszlokációk N_0 számával, valamint egy metszéskor keletkező lépcső által átlagosan létrehozott ponthibák n_1 számával, azaz

$$dn_p = \alpha_1 n_1 N_0 = \alpha_1 \frac{n_1}{bl_d^2} d\gamma, \quad (25)$$

ahol α_1 állandó.

Ha a lépcső a diszlokáció mozgásakor csak kúszó mozgással követheti a diszlokációt, akkor a keletkező ponthibák száma arányos a megtett atomi lépések számával. Ezért n_1 arányos l_s/b -vel, ahol l_s az átlagos szabad úthossz ($l_s^2 \propto A$). Tegyük fel, hogy az átlagos szabad úthossz arányos a metszendő diszlokációk átlagos távolságával, akkor (25)-ből a következő kifejezést kapjuk

$$dn_p = \alpha_2 \frac{d\gamma}{b^2 l_s}, \quad (26)$$

ahol α_2 állandó. Ha feltesszük még, hogy a diszlokációk mozgatásához szükséges feszültség fordítva arányos a szabad úthosszal (azaz az előzők szerint a metszendő diszlokációk átlagos távolságával), tehát

$$\tau_r = \alpha_3 \frac{\mu b}{l_s}, \quad (27)$$

akkor (26) a következő alakban írható

$$dn_p = \frac{A_p}{\mu b^3} \tau_r d\gamma, \quad (28)$$

ahol A_p az előzőekben bevezetett arányossági tényezőket magában foglaló állandó.

(28)-ból a ponthibakonzentráció a térfogategységben levő atomok számával ($1/b^3$) való osztással és integrálással adódik

$$C_p = \frac{A_p}{\mu} \int \tau_r d\gamma. \quad (29)$$

Eredményünk azt mutatja, hogy — mindaddig, amíg a tett feltevések érvényesek — a képlékeny alakváltozás során keletkező ponthiba koncentráció arányos a plasztikus munkával. Ezt az összefüggést más úton először *Saada* határozta meg [15]. Konkrét modell alapján az A_p állandó számértékére a következőt kapta:

$$0,3 < A_p < 0,9. \quad (29)$$

Hasonló megfontolás végezhető diszlokációkra is.

A (20) és (27) összefüggés felhasználásával a diszlokációsűrűség növekménye a következő alakban adható meg:

$$dN = \frac{A_d}{\mu b^2} \tau_r d\gamma, \quad (30)$$

ahol A_d konstans. Ebből a diszlokációsűrűség

$$N = \frac{A_d}{\mu b^2} \int \tau_r d\gamma. \quad (31)$$

A diszlokációsűrűség tehát szintén arányos a plasztikus munkával. Ez azt jelenti, hogy elegendően alacsony hőmérsékleten a deformáció során keletkező ponthibák és diszlokációk száma is arányos egymással. Ez a következtetés jól egyezik előző kísérleti és elméleti eredményekkel [16, 17, 18].

Az A_d állandó értékét a következőképpen becsülhetjük meg. A hosszegységnyi diszlokáció energiája jó közelítéssel μb^2 -nek vehető [7]. Elméleti és kísérleti vizsgálatok szerint a diszlokációk révén tárolt energia az anyagban a teljes plasztikus munkának kb. 5–7%-a [19]. Ezek felhasználásával

$$A_d = \frac{\mu b^2 N}{\int \tau_r d\gamma} = 0,05 - 0,07. \quad (32)$$

Összevetve (30)-at a (28) kifejezéssel a ponthiba és diszlokáció növekmény arányára a következő becslést nyerhetjük:

$$\frac{dn_p}{dN} = \frac{A_p}{A_d b}, \quad \text{azaz} \quad \frac{4}{b} < \frac{dn_p}{dN} < \frac{18}{b}. \quad (33)$$

2. 3. 6. Polikristályok képlékeny alakítása

A gyakorlatban felhasznált fémek soha nem egykristályok, hanem nagyszámú, különböző méretű kristályszemcséből állnak. Amikor külső erő hat egy ilyen polikristályos fémre, akkor a különböző szemcsék csúszási rendszereinek orientációja az erő irányához képest más és más, ezáltal az egyes csúszási síkokban a nyírófeszültség értéke nagyon különböző lesz. A csúszást megindító feszültség és a külső erő között ezért nem írható fel olyan egyszerű összefüggés, mint az egykristályokra

vonatkozó (11) összefüggés. Definiálhatjuk azonban az ott bevezetett Schmid-faktor egy átlagértékét a következőképpen:

$$\bar{m} = \frac{\int N(m) m dm}{\int N(m) dm}, \quad (34)$$

ahol $N(m)$ azon szemcsék száma, amelyekben a csúszási síkok valamelyikének orientációja az m tényezővel adható meg és az integrálást az összes szemcsékre ki kell terjeszteni. Az m tényezőt a külső erő és egy adott csúszási síkban ható nyíró-feszültség kapcsolata révén vezettük be. Az erő irányában fellépő nyúlási és az adott csúszási síkban a nyírási deformációt ugyanez a tényező köti össze. Ez azt jelenti, hogy ha γ -val jelöljük a nyírási és ε -nal a nyúlási deformációt, akkor

$$m = \frac{\sigma}{\tau_r} = \frac{d\gamma}{d\varepsilon}. \quad (35)$$

A (34)-gyel definiált faktor felhasználásával kapcsolatot létesíthetünk ugyanazon anyag egykristályának és polikristályának keményedése között. Feltételezzük, hogy a polikristály nyúlási alakváltozásának megindításához szükséges külső feszültség és az egykristály kritikus nyírási feszültsége között az összefüggés: $\sigma = \bar{m}\tau_r$. Ha a deformáció során $N(m)$ nem változik, akkor (35)-ből a

$$\gamma = \bar{m}\varepsilon \quad (36)$$

összefüggést kapjuk, ami a nyúlási és nyírási deformáció között ad kapcsolatot. Ha továbbá az egykristály $\tau_r = f(\gamma)$ feszültség-deformáció összefüggése ismert, akkor a polikristályra vonatkozó nyírási alakváltozás-feszültség közötti összefüggés:

$$\sigma = \bar{m}f(\gamma) = \bar{m}f(\bar{m}\varepsilon). \quad (37)$$

Az \bar{m} tényező kiszámításához további feltételekre is szükség van. A tapasztalattal és más úton nyert elméleti eredményekkel [13, 20], továbbá a makroszkopikus plaszticitással teljes egyezésben megkaphatjuk \bar{m} értékét a következő feltevések alapján

1. Valamennyi aktív csúszási rendszer a különböző szemcsékben egyformán keményedik.
2. Nincs statisztikus összefüggés az $m_\theta = 1/\cos \theta$ és az $m_\lambda = 1/\cos \lambda$ orientációs faktorok között (itt θ a csúszási irány és a csúszási sík egységnyi területére ható erő közötti szöget, míg λ a külső erő és a csúszási sík normálisa közötti szöget jelenti).
3. A folyás megindulásakor a (6) alatti von Mises-folyási feltétel teljesül.
4. A keményedés mértéke csak az összes nyírástól függ.

Az 1. és 2. feltevésből következik, hogy ha N_θ és N_λ annak valószínűsége, hogy egy kiválasztott szemcsében van egy csúszási rendszer, amelyhez a θ és a λ szögek

tartoznak, akkor a (34) alatti kifejezés a következőképpen írható (figyelembe véve, hogy $N(m) = N_0 \cdot N_\theta \cdot N_\lambda$, ahol N_0 a szemcsék száma)

$$\bar{m} = \frac{\int N_\theta(m_\theta) m_\theta dm_\theta}{\int N_\theta(m_\theta) dm_\theta} \cdot \frac{\int N_\lambda(m_\lambda) m_\lambda dm_\lambda}{\int N_\lambda(m_\lambda) dm_\lambda} = \bar{m}_\theta \cdot \bar{m}_\lambda. \quad (38)$$

Az egyes szemcsék csúszási rendszereinek teljesen statisztikus eloszlása miatt feltehetjük, hogy

$$\bar{m}_\theta = \bar{m}_\lambda = m_0,$$

tehát

$$\bar{m} = m_0^2. \quad (39)$$

Alkalmazzuk a fenti eredményeket először egy egykristály x irányban történő tiszta nyírására. Az egyetlen el nem tűnő feszültségkomponens ebben az esetben $\tau_{xy} = \tau'$. Ha a csúszás egy olyan csúszási sík mentén indul meg, amelynek normális vektora $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$, akkor a területegységre ható erő ezeken a síkokon definíció szerint

$$\underline{\sigma} \vec{n} = \tau' (n_2, n_1, 0), \quad \underline{\sigma} = \begin{pmatrix} 0 & \tau' & 0 \\ \tau' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Legyen a csúszási irány és ezen vektor közötti szög Θ . Akkor a plasztikus nyírás feltétele (2. 3. 1. pont)

$$\tau' = \frac{1}{\cos \Theta} \tau_r = m_\theta \tau_r,$$

ahol τ_r a kritikus csúsztató feszültség.

Felhasználva ezt az összefüggést, a polikristályos testek tiszta nyírásának feltétele

$$\tau = \bar{m}_\theta \tau_r = m_0 \tau_r, \quad (40)$$

ahol \bar{m}_θ -t a (38) egyenlet definiálja.

Tiszta nyújtás esetében a folyási feszültség most a következőképpen adható meg

$$\sigma = m_\sigma^2 \tau_r. \quad (41)$$

Felhasználva a von Mises-feltételből adódó (7) összefüggést, (40) és (41)-ből a következő értékeket kapjuk

$$m_0 = \sqrt{3}, \quad (42)$$

illetve

$$\bar{m} = 3. \quad (43)$$

Ezekkel az adatokkal a kritikus csúsztató feszültség és a nyújtási feszültség, valamint a nyírási deformáció és a nyúlási deformáció között az alábbi egyenleteket nyerjük

$$\frac{\sigma}{\tau_r} = \frac{d\gamma}{d\varepsilon} = 3.$$

A 4. feltevés, valamint m_0 állandóságának kihasználásával megkaphatjuk a polikristályos testek tiszta nyújtására, illetve tiszta nyírására vontkozó feszültség-deformáció összefüggéseket

$$\sigma = 3f(3\varepsilon), \quad (44)$$

és

$$\tau = \sqrt{3} f(3\varepsilon), \quad (45)$$

ahol $\tau_r = f(\gamma)$ a feszültség-deformáció összefüggés egykristály esetén. Végül egy adott $\Delta l/l_0$ megnyúlással egyenértékű nyírási deformációra a következő egyenlet adódik

$$\gamma = 3 \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (46)$$

3. Polikristályos fémek egyidejű plasztikus csavarása és nyújtása

3.1. Bevezetés

Az irodalomban nagy számú olyan vizsgálat ismeretes, amely a képlékeny alakításnak a fémek fizikai tulajdonságára való hatásával foglalkozik [21]. Az elérhető eredmények összehasonlítását igen megnehezíti az a tény, hogy a mérések körülményei sok esetben lényegesen különböznek. Pl. a deformáció módja sokféle lehet (gyűrűn való áthúzás, csavarás, nyújtás, hengerlés stb.), és nem világos jelenleg, hogy milyen módon kell összevetni két eredményt, ha azok különböző deformálási eljárás során adódtak. Az egyidejű plasztikus csavarásra és nyújtásra vonatkozó vizsgálataink egyik célja annak megállapítása, hogy van-e értelme ilyen összehasonlítást tenni, és ha van, hogyan tehető ez meg.

Elsősorban azt kell figyelembe vennünk, hogy rácshibák fizikai vizsgálatakor a deformáció mértékét megadó mennyiségnek nem az alakváltozást, hanem a hibastruktúra változását kell jellemeznie. Könnyen belátható, hogy az alakváltozás általában nem lehet egyértelmű jellemzője a hibastruktúrának. Létrehozhatunk ugyanis egy testen két egymás utáni deformációt úgy, hogy az alakja végül ne változzék. Világos azonban, hogy a folyamat során jelentős számú hiba keletkezett. Egy test alakváltozása és a hibastruktúra változása között ezért általában nincs egyértelmű összefüggés. Ha azonban a deformáció során fellépő összes nyírást (a csúszósíkokban fellépő diszlokáció mozgást) vesszük figyelembe (nem algebrailag), akkor remélhető, hogy legalábbis alacsony hőmérsékleten, ahol eltűnési folyamatok nincsenek, a hibastruktúra változása és az összes nyírás között egyértelmű összefüggés van.

Makroszkopikus vizsgálatok esetén azonban az alakváltozás az, ami jól megfigyelhető és mérhető. Ezért célszerű tisztáznunk, hogy milyen esetekben jellemezhető a hibastruktúra az alakváltozással. Általában, ha egyirányú igénybevétele alkalmazunk (tehát pl. tiszta nyújtást, és nem nyújtást valamint kompressziót felváltva), akkor van értelme az alakváltozást jellemző paraméter és az összes nyírás közti összefüggésről beszélni. Az előző pontban láttuk, hogy a polikristályos testek nyújtásakor egyértelmű összefüggés van az összes nyírás és a relatív megnyúlás között. Ez az összefüggés arányosság volt, ezért ha a nyújtás hatását pl. csavarással akarjuk összevetni, akkor a csavarási deformációt jellemző paraméternek nyilvánvalóan szintén arányosnak kell lennie az összes nyírással.

Célszerű ezt a kérdést egy kissé részletesebben megvizsgálnunk, mert ez nem világos az irodalomban, és ezidáig nem ismeretes olyan szisztematikus vizsgálat, amely az itteni nehézségek tisztázását tűzte volna ki céljául. A nehézségek mibenlétét az alábbi példával szeretnénk megvilágítani. Nyilvánvalóan elfogadható feltevést jelent az, hogy egyértelmű összefüggést kapunk valamely vizsgált fizikai tulajdonság (p) megváltozása és valamilyen a deformáció mértékét jellemző mennyiség (γ_1) között, ha jól definiált alakítási módot — pl. tiszta nyújtást — választunk, és minden egyéb körülmény és kezdeti feltétel ugyancsak jól definiált. Tegyük fel még az egyszerűség kedvéért, hogy ilyen viszonyok között elvégzett mérés eredményeként az alábbi összefüggéshez jutunk:

$$\Delta p = A \gamma_1^2, \quad (47)$$

ahol A állandó. Mérjük meg ezek után ugyanezt a fizikai tulajdonságot ugyanazon az anyagon, az előbbtől különböző deformálási módot alkalmazva. Ha ebben az esetben ismét

$$\Delta p = A' \gamma_2^2 \quad (48)$$

alakú egyenletet kapunk ($A' = \text{konst.}$), semmilyen nehézség nem merül fel. Ez az eredmény azt jelentené, hogy a p tulajdonság változása nem függ a deformáció módjától (a (47) összefüggés alakja nem változik), valamint, hogy a deformáció mértékének jellemzésére választott mennyiségek a hibastruktúra változását azonos módon írják le.

Ha azonban a második kísérlet nem a (48) összefüggést eredményezi, akkor arra kell következtetnünk, hogy vagy a Δp mennyiség függ a deformáció módjától, vagy a deformáció mértékét jellemző paraméterek (γ_1, γ_2) azonos hibastruktúra esetén nem arányosak egymással.

Egy egyszerű példa erre a lehetőségre a következő. Tiszta nyújtás esetén az irodalomban a deformáció mértékét két különböző mennyiséggel szokták jellemezni.

Az egyik a „valódi deformáció” (true strain), $e = \ln \left(1 + \frac{\Delta l}{l_0} \right)$, ahol l_0 a drót kezdeti hosszát, Δl pedig a megnyúlást jelenti, a másik pedig az $\varepsilon = \frac{\Delta l}{l_0}$ mennyiség (conventional strain). Nyilvánvaló, hogy egy nyúláskor nyert eredményt más deformáció során kapottal való összevetéskor nem mindegy, hogy melyik előbbi paraméterrel jellemezzük a nyúlás mértékét.

A plaszticitás fenomenológiai elméletében (ahol az alakváltozás leírása a cél), kétségtelenül a „valódi deformáció” használata indokolt, mert ekkor a főtengelymenti deformációk összege nulla, megegyezésben azzal a tapasztalattal, hogy a képlékeny alakítás során a minta térfogata gyakorlatilag nem változik. Rácshibák vizsgálatakor azonban olyan paraméterekkel kell jellemeznünk a különböző deformációk során fellépő alakváltozásokat, amelyek azonos (pl. arányos) kapcsolatban vannak a hibastruktúra változásával. A következőkben az egyidejű csavarásra és nyújtásra állapítunk meg ilyen összefüggést.

3.2. Az eredő deformáció meghatározása

Induljunk ki a tiszta nyújtásból. A 2.3.3. pontban láttuk, hogy ha a diszlokációk mozgásuk során δA területet súrolnak a kristály egy A területű síkján,

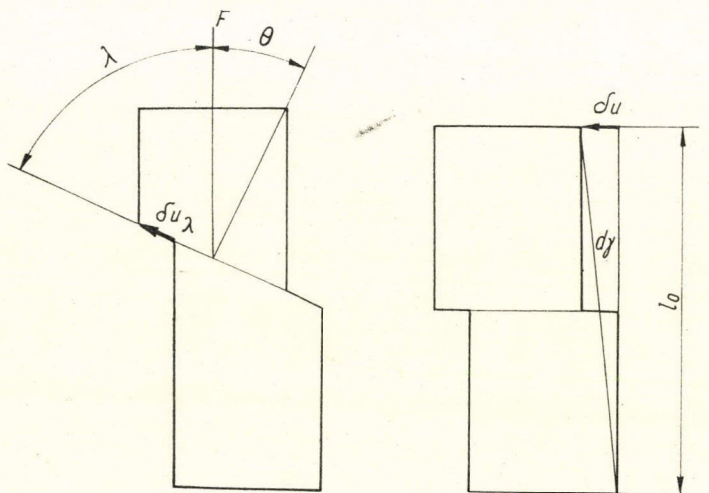
akkor e sík által elválasztott részei a kristálynak egymáshoz képest $\delta u = \frac{\delta A}{A} b$ -vel elmozdulnak. A 3. ábra szerint ezért a két kristályrész tengelymenti relatív elmozdulása

$$\delta u_F = \delta u_\lambda \cos \lambda = \frac{\delta A}{A} b \cos \lambda = \cos \Theta \cos \lambda \frac{\delta A}{A_0} b,$$

amiből

$$d\varepsilon = \frac{\delta u_F}{b} = \cos \Theta \cos \lambda \left(\frac{\delta A}{A_0 l_0} b \right) = \cos \Theta \cos \lambda \frac{\delta u}{l_0}, \quad (49)$$

ahol l_0 a drót hossza, A_0 a keresztmetszete. A $\frac{\delta u}{l_0} = \frac{\delta A}{A_0 l_0} b$ mennyiség jelentése azon-



3. Nyírási elmozdulások egykristályok nyújtásakor

ban a 3. ábrából az a $d\gamma$ nyírási szög, amely a kristály tengelyére merőleges csúszósíkokban való, tehát megnyúlást nem eredményező diszlokációmozgásból adódik. Ezt figyelembe véve egy polikristály makroszkopikus megnyúlása és a most definiált nyírás között adódik a (46) összefüggés

$$\gamma_t = 3 \frac{\Delta l}{l_0}.$$

Vizsgáljuk most meg a tiszta (nyúlás nélküli) csavarás esetét. Ez a 4. ábra szerint képzelhető el. A henger két végpontján alkalmazott forgatónyomaték hatására a kristály $d\vartheta$ szöggel maradónan elcsavarodik. A kristály r sugarú helyén a nyírási deformáció

$$d\gamma_t(r) = \frac{dA(r)}{Al} b = \frac{du_\vartheta(r)}{l} = \frac{rd\vartheta}{l}. \quad (50)$$

Gondolatmenetünkéből világosan kitűnik, hogy ez a nyírási deformáció a diszlokációk mozgása és így az alakváltozás mechanizmusa szempontjából (46)-tal teljesen egyenértékű. Ha a keletkező rácshibák összessége érdekel bennünket, akkor a henger keresztmetszetére való átlagolással definiálhatunk egy átlagos nyírást a következőképpen

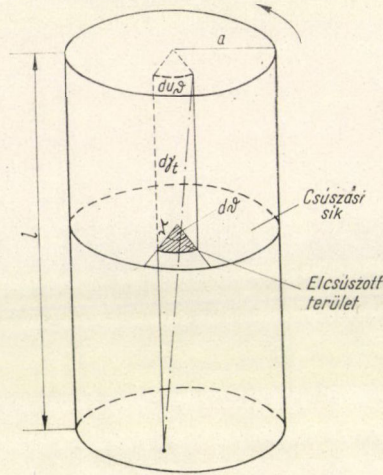
$$d\bar{\gamma}_t = \frac{1}{a^2 \pi l} \int_0^a 2\pi r^2 d\vartheta dr, \quad (51)$$

ahol „ a ” a henger külső sugara. Ha feltesszük, hogy $d\vartheta$ nem függ r -től — ami az átlagos elcsúszás meghatározásában megengedhető közelítés — akkor a következő kifejezésre jutunk

$$d\bar{\gamma}_t = \frac{2}{3} \frac{a d\vartheta}{l}. \quad (52)$$

Véges elcsavaráskor pedig

$$\bar{\gamma}_t = \frac{2}{3} \int_0^{\vartheta} \frac{a d\vartheta}{l}. \quad (53)$$



4. ábra. Nyírási deformáció kialakulása nyúlás nélküli csavaráskor

Ezzel meghatároztuk azt az átlagos nyírási deformációt, amely egy polikristályos drótban ϑ szöggel való plasztikus csavaráskor kialakul.

Polikristályos fémdrótok plasztikus csavarásakor azonban mindig nyúlás is fellép. Ezt a jelenséget először *Pointing* figyelte meg [22]. Ez előző megfontolásainkból természetes következményként adódik, mert a polikristályos testek maradó elcsavarásakor a csúszásoknak szükségképpen van tengelymenti komponensük is. Ezek a komponensek azonban nem egyenletesen oszlanak el a tengely mentén, ezért tiszta csavaró nyomaték alkalmazásakor a drót hullámossá válik [23]. Kicsiny tengelymenti feszültség (~ 1 kp/mm²) is elegendő azonban ahhoz, hogy a drót nyúlása egyenletessé és így jól mérhetővé váljék [24]. A tengelymenti feszültség változtatásával ugyanazon csavarási deformáció mellett különböző megnyúlások keletkeznek. Ezáltal elérhető, hogy az egyidejűleg fellépő kétféle deformáció mértékének a viszonyát változtassuk, és így megvizsgáljuk a fejezet elején felvetett kérdést, hogy különböző deformációk hogyan tehetők össze.

Az előzőkből világos kell legyen, hogy ha olyan paraméter változását vizsgáljuk, amely csak az összes rácshiba hatását mutatja, akkor az egyidejű csavarást és nyújtást jellemző deformáció az összes nyírással adható meg, azaz

$$\gamma = \frac{2}{3} \int_0^{\vartheta} \frac{a d\vartheta}{l} + 3 \frac{\Delta l}{l_0}.$$

Felhasználva, hogy képlékeny alakváltozáskor a minta térfogata gyakorlatilag nem változik ($a^2 \cdot l = a_0^2 \cdot l_0$), ahol a_0, l_0 a minta kezdeti adatai, kifejezésünk a követ-

kező alakban írható

$$\gamma = \frac{2}{3} \frac{a_0 \bar{\Theta}}{l_0} + 3 \frac{\Delta l}{l_0}, \quad (54)$$

ahol

$$\bar{\Theta} = \int_0^{\theta} \frac{d\vartheta}{\left[1 + \frac{\Delta l(\vartheta)}{l_0}\right]^{3/2}}. \quad (55)$$

3.3. Folyási feszültség-deformáció összefüggés csavarási deformációra

A csavarási deformáció során fellépő inhomogén deformáció általában megnehezíti a tanulmányozott jelenség leírását és az eredmények értelmezését. Valószínűleg ez az oka annak, hogy a csavarási deformáció nem képezi alapját az irodalomban a fémek plasztikus tulajdonságaira vonatkozó vizsgálatoknak. A következőkben röviden, de kritikailag áttekintjük az irodalomban ismert eredményeket és viszonylag egyszerű módszert adunk a feszültség-deformáció összefüggés mérésére, amely a tiszta nyújtással egyenértékű eredményekre vezet.

A plasztikus csavarási deformáció megindításához szükséges feszültség meghatározása bonyolultnak tűnik, mert a működő feszültségek összetettebbek mint nyújtás esetén, továbbá a minta különböző sugarú helyein a deformáció és a feszültségek értékei különbözők. A feszültségi állapotra jellemző és mérhető paraméter nyilvánvalóan az a forgatónyomaték, amelynek alkalmazásakor a plasztikus csavarás megindul. Ez a forgatónyomaték azonban bonyolult módon függ össze a minta adott sugaránál működő feszültségekkel. Világos ugyanis, hogy a plasztikus deformáció állapotában a feszültségek a sugár mentén általában nem lineárisan változnak.

Legyen $\tau(r, \Theta_a)$ az r sugarú helyen működő feszültség a pillanatnyi csavarási folyáshatárhoz tartozó forgatónyomatékkal terhelt testben. Akkor ez a forgatónyomaték a következő kifejezéssel adható meg

$$M(a, \Theta_a) = 2\pi \int_0^a \tau(r, \Theta_a) r^2 dr, \quad (56)$$

ahol Θ_a az előzőleg már alkalmazott plasztikus csavarás szöge hosszegységenként. Ezt a szöget a mintát a berendezésbe rögzítő fej elfordulásából észleljük, ezért ez a szög a minta kerületén fellépő plasztikus deformációhoz tartozik. Ezen szög és a forgatónyomaték mérésével kaphatjuk meg a forgatónyomaték-csavarási szög összefüggést (torque-twist curve), amely alapját képezi valamennyi csavarási vizsgálatnak. A képlékeny alakváltozás mechanizmusára azonban a feszültség-deformáció összefüggés jellemző. Azt a kérdést kell ezért megvizsgálnunk, hogy megadható-e ez utóbbi összefüggés a forgatónyomaték-csavarási szög görbe ismeretében. A feladat megoldására az irodalomban általánosan alkalmazott eljárás [25] Nádai-tól származik [26]. Gondolatmenete a következő. Tegyük fel, hogy nagy alakváltozások után a minta sugara mentén a deformáció lineárisan változik, azaz

$$\gamma(r) = \frac{r\vartheta_a}{l} = r\Theta_a,$$

továbbá $\tau(r, \Theta_a) = \tau(\gamma)$, azaz a feszültség egy adott helyen csak az ott levő deformációtól függ. Ekkor az $r = \frac{\gamma}{\Theta_a}$ helyettesítéssel az (56) egyenlet a következő alakú lesz

$$M \Theta_a^3 = \frac{M \gamma_a^3}{a^3} = 2\pi \int_0^{\gamma_a} \tau(\gamma) \gamma^2 d\gamma, \quad (57)$$

ahol γ_a a deformáció a minta kerülete mentén. Ebből az egyenletből γ_a szerinti differenciálással meghatározható a $\tau = \tau(\gamma_a)$ összefüggés [25].

A fentiekben tett feltevésekkel szemben a következő ellenvetések tehetők. A deformáció lineáris összefüggése a sugárral jó közelítést jelenthet az összes nyírás meghatározásában, de jelentős hibát okozhat az (56) integrál értékében. Lényegesebb azonban az, hogy a csavarási folyáshatárhoz tartozó forgatónyomaték alkalmazásakor a feszültség egy adott sugarú helyen nem lehet csak a helyi deformáció függvénye. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a folyási forgatónyomaték elérése rugalmas deformációkon keresztül történik, s ezért a folyáshatárig a (2) összefüggésnek kell teljesülnie. Ebben pedig a folyáshatárig elérhető M_r/a^4 mennyiség Θ_a -nak bonyolult és nem $f(\gamma) \cdot \Theta_a$ alakú függvénye, ezért az $r = \frac{\gamma}{\Theta_a}$ helyettesítés nem adhat csak γ -tól függő τ -t. Más szóval az (57) egyenlet differenciálásakor a jobb oldalon nem egyszerűen az integrandusz marad meg, mert az előzők szerint $\tau = \tau(\gamma, \Theta_a)$ lehet csak, ahol Θ_a valamilyen függvénye γ_a -nak.

A vázolt nehézségek elkerülése csak azáltal lehetséges, hogy az (56) egyenletet minden változtatás nélkül rögzített Θ_a mellett a szerint definiáljuk. Ekkor a következő kifejezést nyerjük

$$\left(\frac{\partial M}{\partial a} \right)_{\Theta_a} = 2\pi \tau(a, \Theta_a) a^2. \quad (58)$$

Ez azt mutatja, hogy a csavarási folyáshatáron bármely Θ_a -nál fellépő forgatónyomaték rugalmas feszültségektől származik, mert (1)-ből

$$\left(\frac{\partial M}{\partial a} \right)_{\Theta_a} = 2\pi \mu(a, \Theta_a) \Phi(a, \Theta_a) a^3 = 2\pi \tau_{\text{rug}}(a, \Theta_a) a^2. \quad (59)$$

Eredményünk szerint a pillanatnyi csavarási folyáshatárhoz tartozó forgatónyomaték alkalmazásakor a minta kerületén működő feszültség a $\Phi(a, \Theta_a)$ rugalmas elcsavarásból származik. Nyilvánvaló, hogy ez éppen a kerületen meginduló nyírás folyáshatára kell legyen, mert ha nagyobb lenne, akkor a csavaródás már megindult volna, ha pedig kisebb lenne, akkor a forgatónyomaték nem a pillanatnyi csavarási folyáshatárhoz tartoznék.

Figyelembe véve a (2) összefüggést, a minta peremén a folyási feszültség és deformáció ($\gamma_a = a\Theta_a$) között az alábbi egyenlet ad kapcsolatot

$$\tau(\gamma_a) = \frac{2M(\gamma_a)}{\pi a^3}. \quad (60)$$

A folyáshatárhoz tartozó forgatónyomaték mérésével tehát a feszültség-deformáció összefüggés közvetlenül adódik.

Az (59) kifejezésből rögtön következik, hogy ha a rugalmas állandók változását elhanyagoljuk, akkor a feszültség-deformáció görbe alakja a folyáshatárhoz tartozó rugalmas elcsavarodás szögének (Φ) mérésével igen egyszerűen meghatározható [27]. Legyen Φ_A valamely rögzített γ_A deformációhoz tartozó rugalmas elcsavarodási szög, akkor tetszőleges γ_a -ra

$$\frac{\tau(\gamma_a)}{\tau(\gamma_A)} = \frac{\tau}{\tau_A} = \frac{a\Phi}{a_A\Phi_A} = \frac{a l_A \varphi}{a_A l \varphi_A}.$$

Felhasználva ismét a térfogat állandóságát a deformáció során ($a^2 l = a_A^2 \cdot l_A$), a következő egyenletet nyerjük

$$\frac{\tau}{\tau_A} = \left(\frac{l_A}{l} \right)^{3/2} \frac{\varphi}{\varphi_A}. \quad (61)$$

Látni fogjuk, hogy a rugalmas elcsavarodás szöge könnyen mérhető, és így a feszültség-deformáció görbe alakja erőmérés nélkül meghatározható.

4. A képlékeny alakítás hatása az elektromos ellenállásra

4.1. Irodalmi áttekintés

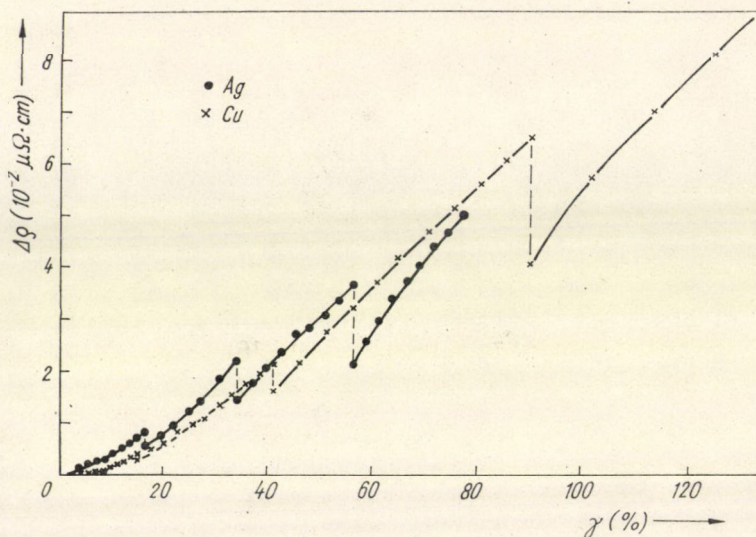
Ha egy fémbe rácshibák (vakancia, intersticiális atom, diszlokáció, rétegződési hiba stb.) keletkeznek, a fém ellenállása megnövekszik [28]. Ezért a képlékeny alakítás során keletkező rácshibák által okozott elektromos ellenállásváltozás mérése lehetőséget nyújt az alakváltozás mechanizmusának vizsgálatára. Az első ilyen jellegű vizsgálatot *Molenaar* és *Aarts* végezte 1950-ben [29], amelyet azután számos további követett [30, 31, 32, 33]. Valamennyi kellően megbízható körülmények között végzett mérés 78°K -on vagy alacsonyabb hőmérsékleten történt. Az 1957-ig ismeretes eredményekről *van Bueren* adott egy kritikai összefoglalást [34]. Ebből kitűnik, hogy a különböző szerzők eredményei jelentősen eltérnek egymástól, ezért a képlékeny alakítás mértéke és az elektromos ellenállásváltozás közötti összefüggésről kialakítható kép nem volt túlságosan megnyugtató. Az alakítás módja a szóban forgó vizsgálatokban szinte kizárólag nyújtás, tehát az alakításnak legjobban definiált formája volt, ennek ellenére lényeges különbségek mutatkoztak az észlelt ellenállásváltozásokban [34]. Kevésbé tisztázott probléma volt továbbá, hogy milyen módon vehető figyelembe a különböző fajtájú (pl. nyújtási és csavarási) deformációk eredő hatása. *Pry* és *Hennig* [35], valamint *van Bueren* és *Jongenburger* [36] végzett csavarással kombinált nyújtás méréseket, az ezekből levonható következtetések azonban nem sok eredményt jelentettek.

Nem változott a helyzet lényegében az 1957 utáni években sem. Az irodalomban a fajlagos ellenállásváltozás deformáció függésére a *van Bueren* által felállított

$$\Delta \rho = A \varepsilon^p \quad (62)$$

empirikus összefüggést szokták megadni [21, 34, 37], ahol A és $p > 1$ állandók. Elméleti és kísérleti eredmények egyaránt mutatják azonban, hogy a (62) alatti formulának nincs fizikai értelme [37, 38, 39].

Ez az állítás minden további meggondolás nélkül egyértelmű igazolást nyer az 5. ábrából. Ez olyan cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten mért ellenállásváltozás-deformáció összefüggést mutat, ahol a mérés folyamatát megszakítottuk, s a minta szobahőmérsékletre való felmelegítése és újra hűtése után, ismét folytattuk. Látható, hogy a (62) típusú összefüggés alkalmazása esetén a kitevő értéke az előzetes deformációtól igen erősen függ, és így (62) nem jellemző az ellenállásváltozás-deformáció kapcsolatára.

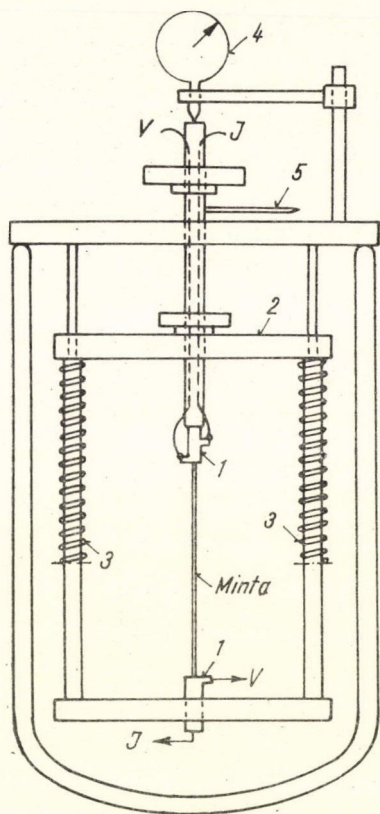


5. ábra. Előzetes deformáció hatása az ellenállás-változás-deformáció görbe alakjára. Növekvő előzetes deformációval a konvex görbe ($p > 1$) fokozatosan konkávba megy át ($p < 1$)

Az intézetünkben folyó vizsgálatok a fenti nehézségek tisztázására irányulnak. A következőkben cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten egyidejű csavarási és nyújtási deformáció hatására fellépő ellenállásváltozás tulajdonságait taglaljuk. Az eredmények egy részéről már több korábbi cikkben beszámoltunk [18, 24, 39, 40]. Jelen dolgozatban összefoglaló képet kívánunk adni az ellenállás mérésekből az alakváltozás és hibakeletkezés mechanizmusára levonható következtetésekről. Látni fogjuk, hogy az ellenállásváltozás szoros kapcsolatba hozható az alakítási keménység folyamatával, és így igen értékes információkat foglal magában. A jelenségek most tárgyalásra kerülő értelmezése a képlékeny alakváltozással kapcsolatban több új eredményre vezet.

4.2. A kísérleti berendezés leírása [41]

A mérésekhez használt berendezés sematikus rajza a 6. ábrán látható. A vizsgálandó 0,5–1,0 mm átmérőjű, kb. 100 mm hosszú mintákat lágyforrasztással rögzítettük az 1) befogófejekbe. A 2) síklap könnyen mozoghat a tengely mentén, így a 3) rugók kissé megfeszítik a mintát, ami egyenletes nyúlást tesz lehetővé.



6. ábra.
A mérőberendezés sematikus rajza

A minta megnyúlásának mérése a 4) mérőórával történik. Az elcsavarás szögét az 5) mutató jelzi. A csavaró tengely golyócsapágyazva van, amivel a deformáció rugalmas része megszüntethető. Az ellenállásméréshez szükséges I áram és V potenciálvezetékek az ábrán látható módon vannak elhelyezve. Az egész apparátus a mérés során cseppfolyós nitrogénnel telt termosztóban helyezkedik el.

Az ellenállás mérését Ohm törvénye alapján két kompenzátoros módszerrel végeztük. A felhasznált készülékek precíziós kompenzátorok és nagy feszültség érzékenyséű galvanométerek voltak. A mérés pontosságát a használt galvanométerek pontossága szabja meg. A feszültségmérésre alkalmazott galvanométerünk érzékenysége jobb mint $0,1 \mu V/mm \cdot m$. Mivel az alkalmazott áramerősség kb. egy amper volt, ezért az ellenállásváltozás mérésének alsó határa kb. $0,1 \mu\Omega$, ami a fajlagos ellenállás megváltozásában $10^{-9} - 10^{-10} \Omega \cdot cm$ mérési pontosságot jelent.

A fenti berendezés segítségével az ellenállásváltozás és a megnyúlás a csavarási deformáció függvényében mérhető. A fajlagos ellenállás megváltozásának számításakor a geometriai méretváltozásokat is figyelembe kell vennünk. Ha feltesszük, hogy a minta térfogatának megváltozása a deformáció során elhanyagolható, akkor a hosszváltozásból a keresztmetszet változása a következő összefüggésből számítható ki

$$la^2 = I_0 a_0^2, \quad (63)$$

ahol l és a a minta pillanatnyi, I_0 és a_0 pedig a minta kezdeti méreteit jelentik. (63) felhasználásával a fajlagos ellenállás megváltozása (feltéve, hogy az áram a mérés során állandó)

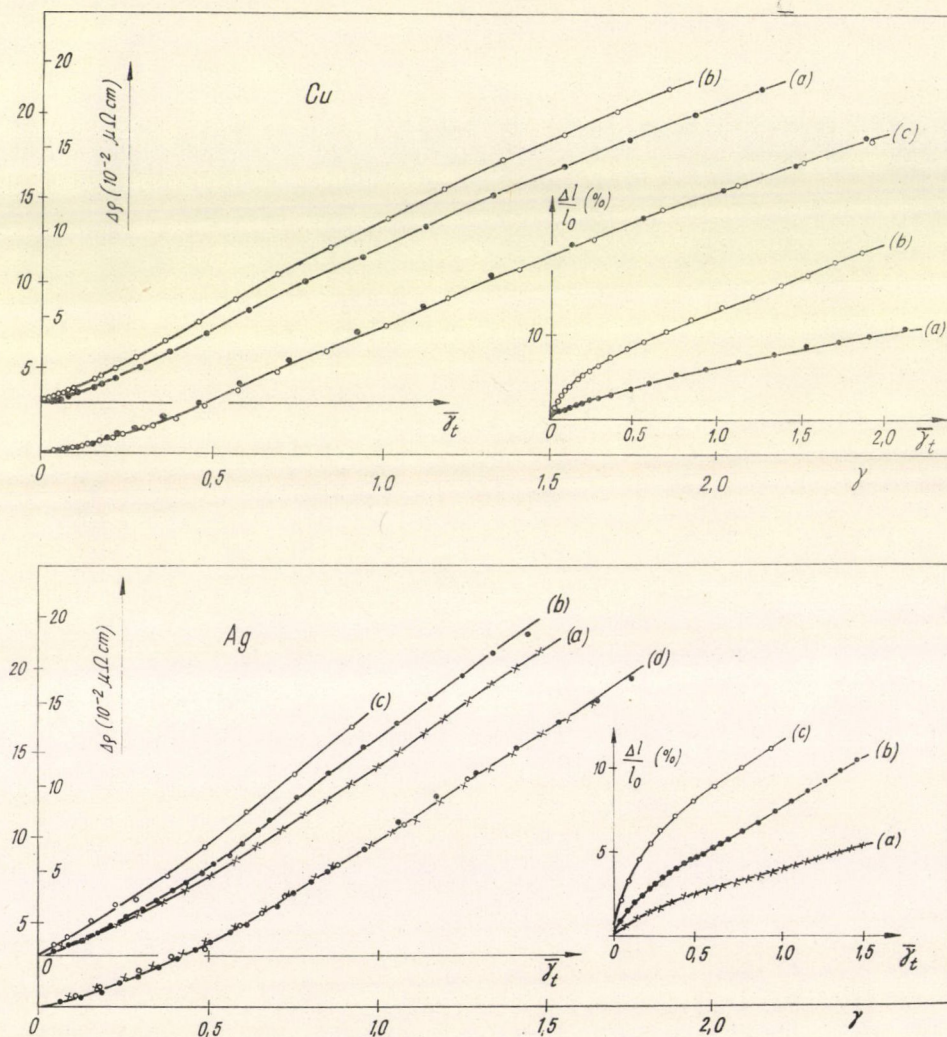
$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \frac{V}{V_0 \left(1 + \frac{\Delta l}{l_0}\right)^2} - 1, \quad (64)$$

ahol V_0 a kezdeti, és V a pillanatnyi mért feszültség a mintán.

4. 3. Kísérleti eredmények az egyidejű nyújtás és csavarás hatására

Polikristályos réz, arany, ezüst és alumínium mintákat vizsgáltunk. Ezek általában különböző tisztaságúak voltak, és különböző előzetes hőkezelést kaptak vákuumban. A 7., 8. és 9. ábrák réz, ezüst és arany jellegzetes görbéit mutatják. A vizsgált minták jellemzőit az 1. táblázat tartalmazza.

Jól látható, hogy ha az ellenállásnövekedést csak a csavarási deformáció függvényében ábrázoljuk, akkor általában különböző görbékert kapunk. Ezeken a görbékén ugyanazon csavarási deformációhoz nagyobb ellenállásváltozás tartozik (a, b görbék), ha a megnyúlás is nagyobb (a', b' görbék). A 3. pontban már jeleztük, hogy bizonyos fizikai tulajdonságok makroszkopikus megváltozása a deformáció során kialakuló összes nyírással függ össze. Nyilvánvalóan az ellenállás is ilyen tulajdonság, mert a megváltozás a szórócentrumok számával, azaz a keletkező hibák számával arányos, ami pedig az összes nyírás eredményeként alakul ki. Vár-



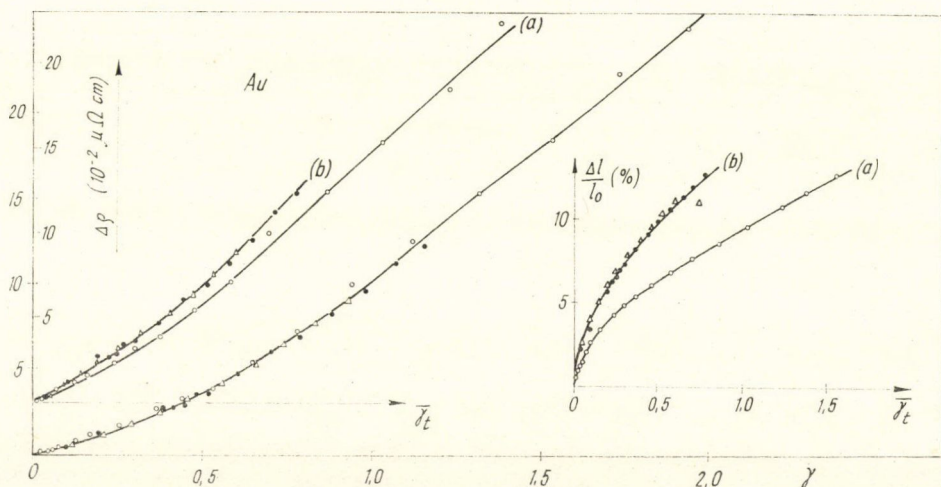
7., 8., 9. ábra. A deformációk összetevésére vonatkozó (54) összefüggés igazolása elektromos ellenállásváltozásra rézben, ezüstben és aranyban

1. TÁBLÁZAT

Anyag	Tisztaság	Hőkezelés
Cu	zónaolvasztott (Csepeli Fémmű)	550 C°, 3 óra
Ag	99,99% (Állami Pénzverde)	550 C°, 3 óra
Au	99,99% (Állami Pénzverde)	550 C°, 3 óra

hatjuk ezért, hogy az ellenállásváltozás az (54) alatti, az összes nyírást megadó kifejezés függvényében egyértékűvé válik. Ezt az összefüggést a c görbék mutatják az előbbi ábrákon. Ezek egyértelműen igazolják, hogy az ellenállásváltozás csak az összes nyírástól függ, és független attól, hogy ez milyen arányú nyúlásból, illetve csavarásból tevődik össze.

Az (54) formula helyességét alumíniumra Ceresara és munkatársai [42], valamint rézre Heussler és Lange is igazolták [43].



9. ábra

5. A képlékeny alakváltozás mechanizmusának vizsgálata az ellenállás mérések alapján

5.1. Bevezetés

Az alakváltozás mechanizmusának megértésére az irodalomban számos modell dolgoztak ki [14]. Ezek szinte kizárólag egykristályokra vonatkoznak. A polikristályos anyagokban a szemcsehatárok módosítják a különböző jelenségek lefolyását az egykristályokhoz képest. Világos azonban, hogy az egykristályok tulajdonságainak

lényeges vonásai a polikristályok viselkedésében is megtalálhatók kell legyenek. A jellegzetes vonások megjelenésének intenzitása várhatóan függvénye a polikristályon alkalmazott deformáció módjának. A nyújtási deformáció valószínűleg elmozdítja az egykristály tulajdonságokat, mert a külső feszültség hatására az anyagban nem nyíró feszültségek ébrednek, és az egyes szemcsékben ezáltal keletkező hidrosztatikus feszültségkomponensek szerepe nehezen vehető figyelembe.

Ebből és más szempontból is a csavarási deformációnak lényeges előnyei vannak. Mivel a külső feszültség hatására csavaráskor nyíró feszültségek ébrednek az anyagban, a megvalósuló viszonyok az egykristályokéhoz közelállóbbak lesznek. Ugyanakkor az anyagok deformálhatósága is sokkal nagyobb (a törés sokkal nagyobb deformációk után következik be) csavaráskor mint nyújtáskor, így az igen nagy deformációk ($\gamma > 1$) hatása is tanulmányozható.

A fenti megfontolások alapján várhatjuk, hogy a csavarási deformáció során vizsgált paraméterek változásában kellő jellegzetességgel megtalálhatók az egykristály tulajdonságok. A következőkben igazoljuk ezt a következtetést. A 2. 3. pontban tárgyalt elméleti eredmények alapján megvizsgáljuk, hogy milyen összefüggést kellene kapnunk az ellenállásváltozás és deformáció között egykristályra, majd ezeket összevetjük a polikristályon mért kísérleti adatokkal. Mivel a szemcsehatárok szerepe a kis deformációk esetén kell lényegesebb legyen, ezért csak a nem túl kis deformációkkal kapcsolatos jelenségek tárgyalására szorítkozunk (kb. $\gamma > 0,02$).

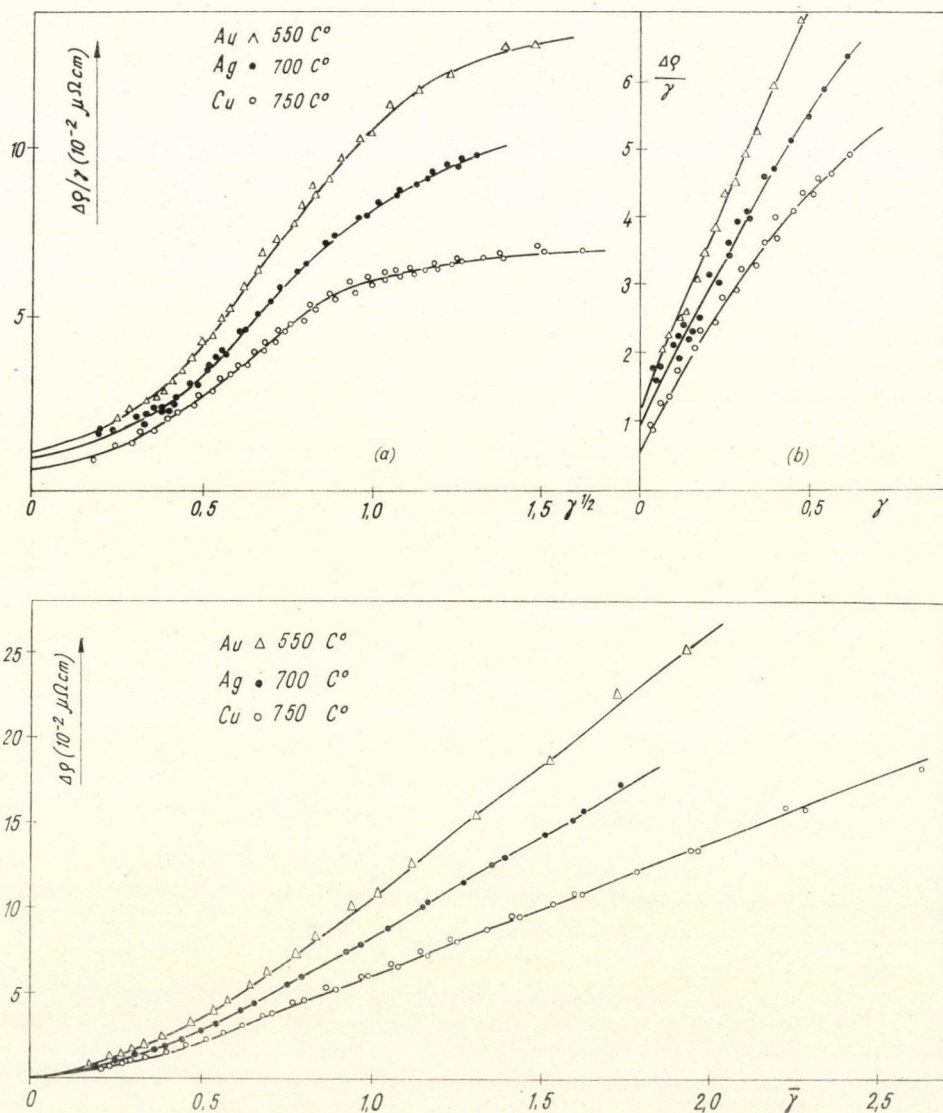
Először nagytisztaságú, jól hőkezelt mintákra vonatkozó eredményekkel foglalkozunk. Az alkalmazott hőkezelést úgy választottuk meg, hogy a kialakuló szemcse méret viszonylag nagy legyen, a szemcsehatárok szerepének csökkentése miatt, de a minta még elég nagy számú szemcsét tartalmazzon ahhoz, hogy a 2. 3. 6. illetve 3. fejezetben alkalmazott statisztikus megfontolások érvényesek legyenek. A minták adatait a 2. táblázat tartalmazza.

2. TÁBLÁZAT

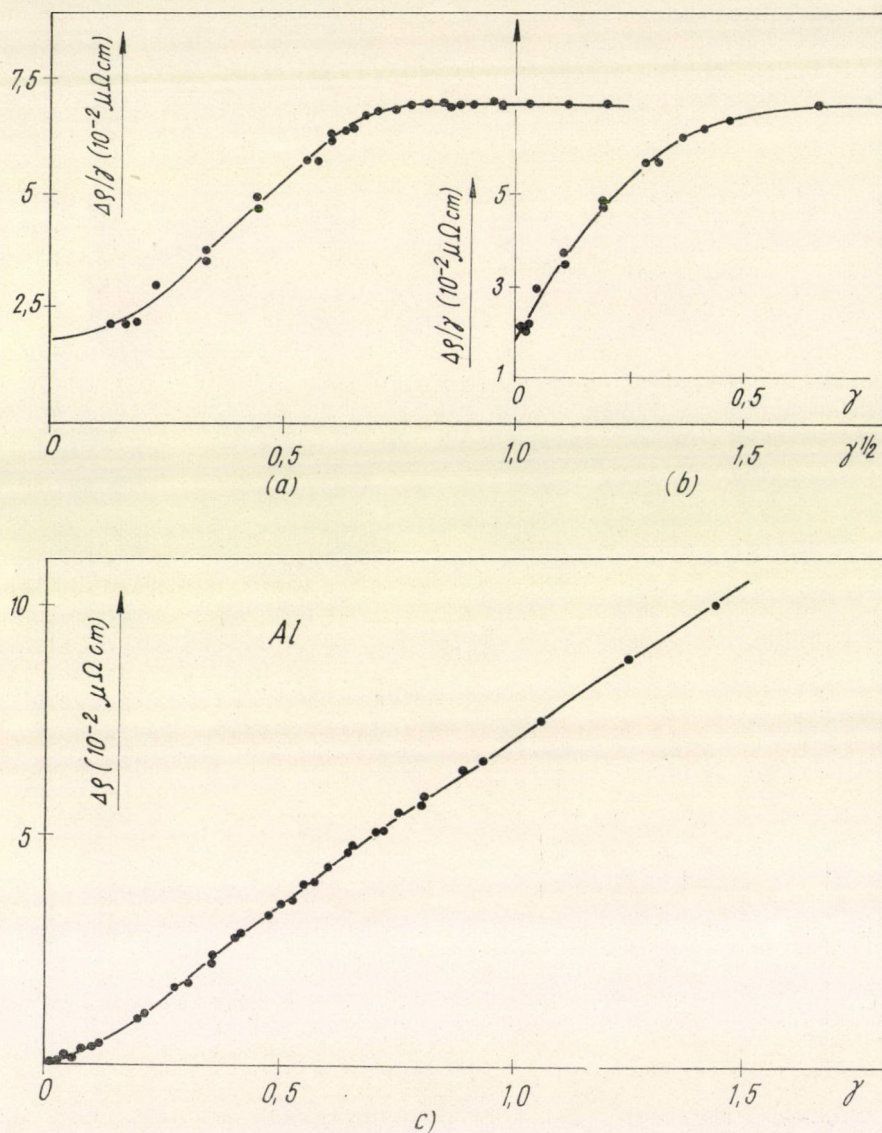
Anyag	Tisztaság	Hőkezelés
Cu	99,999% (Johnson and Matthey)	750 C°, 3 óra
Ag	99,99% (Állami Pénzverde)	700 C°, 3 óra
Au	99,99% (Állami Pénzverde)	550 C°, 3 óra
Al	99,999% (Fémipari Kutató Int.)	500 C°, 30 perc

Valamennyi anyagra kapott eredményeink egységesen értelmezhetők azon felismerés alapján, hogy az ellenállásváltozás és az alakítási keményedés folyamata (6. 2. pont) a $0,02 < \gamma < 2$ intervallumban három szakaszra osztható. Ez egyértelműen kitűnik a 10a—11a. ábrákból. Itt a $\Delta\sigma/\gamma$ mennyiséget ábrázoltuk $\gamma^{1/2}$ függvényében a következőkben ismertetett megfontolások alapján. Valamennyi görbe ebben az ábrázolásban egy konvex, egy lineáris és egy konkáv tartományból tevődik össze. A görbék jellegváltozásai nyilvánvalóan különböző fizikai folyamatok fellépéséből

származnak. A következőkben megmutatjuk, hogy a konvex tartomány az alakváltozási folyamat II. szakaszának, a lineáris tartomány a III. szakasznak felel meg. A konkáv tartomány az alakváltozási folyamat egy újabb, IV. szakaszát jelenti, amelyet az irodalomban eddig még nem figyeltek meg.



10. (a, b) ábra. Az alakváltozási folyamat három szakaszt osztható (a), (konvex, lineáris és konkáv tartományok); b.: a II. szakasz paramétereinek meghatározásához
10c ábra. A IV. szakasz paramétereinek meghatározásához



11. ábra. Ugyanaz, mint a 10. ábrán, alumínium esetén

5.2. Az alakváltozási folyamat II. szakasza

A 2.3.5. pontban láttuk, hogy mind a ponthiba, mind a diszlokáció koncentráció megváltozása arányos a plasztikus munkával mindaddig, amíg a (27) feltevés érvényes. Ez a feltevés a keményedés II. (lineáris) szakaszára biztosan helyes, mert a kísérleti tapasztalatokkal egyezésben a feszültség és deformáció között lineáris

összefüggésre vezet. Az ellenállásváltozás azonban arányos a hibakoncentráció növekedésével, tehát az előzők alapján a plasztikus munkával. Ezért a II. szakaszban az ellenállás deformációfüggésére a következő alakú kifejezést várhatjuk:

$$\Delta \varrho = \Delta \varrho_{II}(\gamma_{II} + \frac{1}{2}\gamma), \quad \gamma < 0,2 \quad (65)$$

ha a feszültség-deformáció összefüggést

$$\tau = \chi_{II}(\gamma_{II} + \gamma), \quad \gamma < 0,2 \quad (66)$$

alakban vesszük fel. A (65) alakú kifejezés helyességét úgy vizsgálhatjuk meg a legegyszerűbben, ha a $\Delta \varrho/\gamma$ mennyiséget ábrázoljuk γ függvényében. Ezt mutatják a 2. táblázatban megadott mintákra a 10b—11b. ábrák. Látható, hogy valamennyi vizsgált anyagra a $\Delta \varrho/\gamma$ görbe kezdeti szakasza jól definiáltan egyenes, amely nem az origóból indul, azaz egy meghatározott tartományban $\Delta \varrho$ a (65) típusú összefüggés szerint változik.

Ebből rögtön igazolhatjuk azt a fontos következtetést, hogy a (62) formulának nincs fizikai tartalma. (62)-ből ugyanis az következik, hogy a $\Delta \varrho/\gamma$ mennyiség $\gamma \rightarrow 0$ esetén szintén nullához tart (mert $p > 1$), ami a kísérleti és elméleti eredményünknek ellentmond. Ez a következtetés teljes egyezésben van Akulov más úton kapott eredményével [38].

A különböző anyagokra kapott $\Delta \varrho_{II}$ és γ_{II} értékeket a 3. táblázat tartalmazza.

3. TÁBLÁZAT
($\Delta \varrho$ -k egysége 10^{-8} ohm cm)

Anyag	$\Delta \varrho_{II}$	γ_{II}	$\Delta \varrho_{III}$	γ_{III}	$\Delta \varrho_{IV}$	γ_{IV}
Cu	16,8	0,042	11,5	-0,08	7,7	-0,22
Ag	19,6	0,078	14,7	-0,08	12,0	-0,32
Au	24,4	0,045	19,4	-0,009	14,8	-0,34
Al	30,4	0,062	13,8	+0,05	7,0	0

5. 3. Az alakváltozási folyamat III. szakasza

A 10b—11b. ábrákból kitűnik, hogy a (65) típusú kifejezés növekvő deformációval érvényét veszti. Bizonyos átmeneti tartomány után az alakváltozási folyamatnak egy újabb szakasza (III., vagy parabolikus szakasz) jelenik meg, megegyezésben az egykristályokon végzett megfigyelésekkel.

Tegyük fel, hogy a (27) feltevés az egykristályok III. szakaszára is érvényes, akkor a hibakoncentráció változása itt is arányos a plasztikus munkával. A 6. 2. pontban megmutatjuk továbbá, hogy ebben a szakaszban a feszültség és deformáció közötti összefüggés a

$$\tau = \chi_{III}(\gamma_{III} + \gamma^{1/2}), \quad 0,2 < \gamma < 0,8 \quad (67)$$

alakban adható meg. Az ellenállásváltozásra ebben a szakaszban ezért a következő összefüggést várhatjuk

$$\Delta\varrho = \Delta\varrho_{III}(\gamma_{III} + \frac{2}{3}\gamma^{1/2}), \quad 0,2 < \gamma < 0,8. \quad (68)$$

A 10a—11a. ábrák mutatják a $\Delta\varrho/\gamma$ mennyiséget $\gamma^{1/2}$ függvényében. A lineáris szakaszok megjelenése egyértelműen jelzi a (68) összefüggéssel leírható tartomány létezését.

A $\Delta\varrho_{III}$, γ_{III} paraméterek értékeit a 3. táblázat tartalmazza.

5.4. Az alakváltozási folyamat IV. szakasza

A deformáció további növekedése során az ellenállásváltozás-deformáció összefüggés lineárisrá válik (10c—11c ábrák). Ez a tény az alakváltozási folyamat egy újabb szakaszának fellépését jelenti. Ebben a szakaszban:

$$\Delta\varrho = \Delta\varrho_{IV}(\gamma_{IV} + \gamma). \quad (69)$$

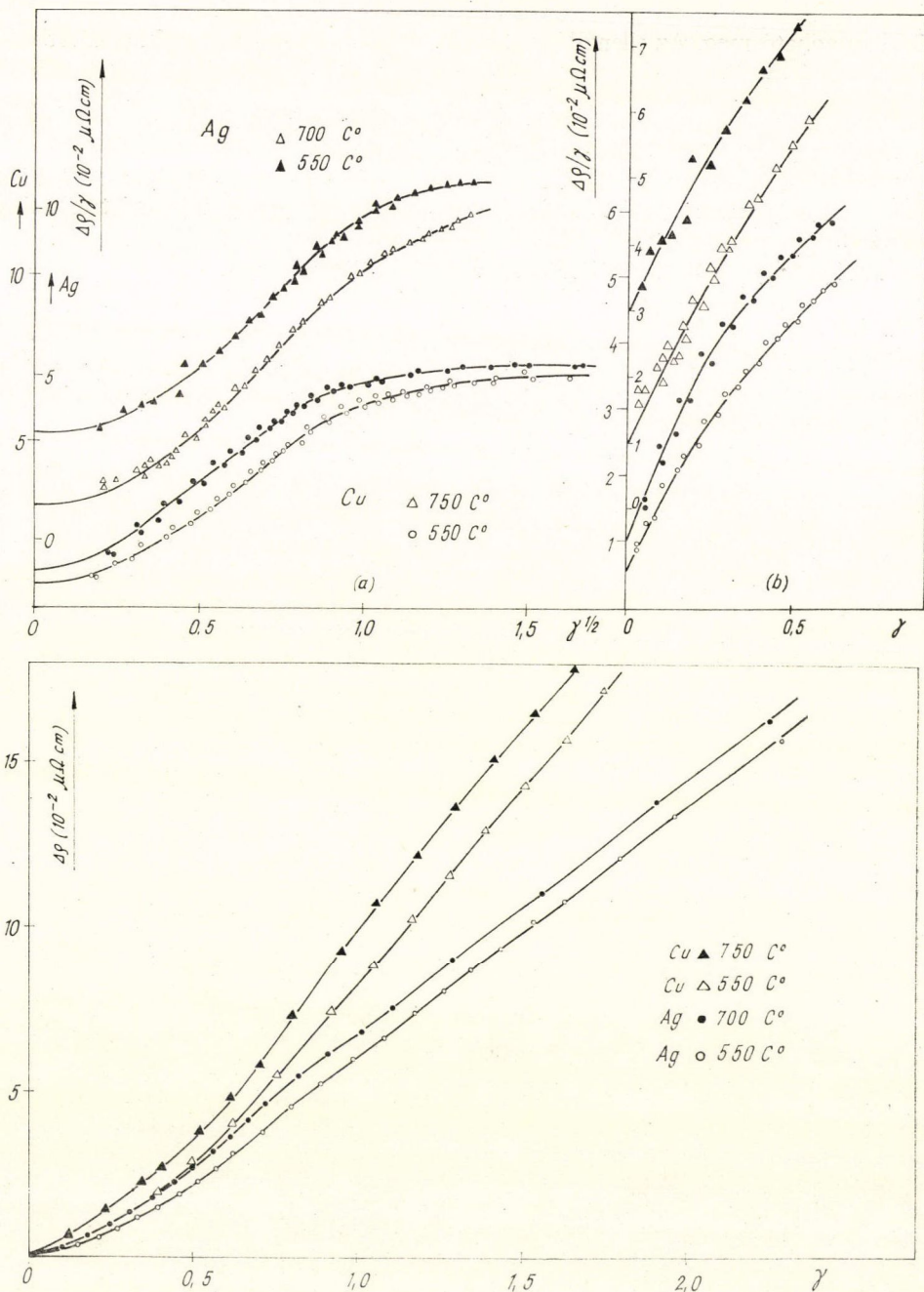
A megfelelő paraméterek értékeit a 3. táblázatban foglaltuk össze.

Ezt a IV. szakaszt az irodalomban eddig még nem észlelték. Ennek valószínűleg az az oka, hogy ilyen nagy deformációkat, amelyeknél ez bekövetkezik, csak csavarással lehet elérni polikristályos anyagon. Említettük azonban, hogy csavarási deformációval végzett szisztematikus vizsgálat nem ismeretes az irodalomban. Egykristályon elérhető ugyan kb. 100%-os nyírási deformáció [44], ez azonban még csak az átmeneti tartományt érinti. Ilyen nagy deformációk során ellenállásmérést *Blewitt* és *munkatársai* végeztek réz egykristályon [44]. Méréseik 4 K°-on történtek, ahol a feszültség-deformáció összefüggésben csak a II. szakasz észlelhető, mivel már a III. szakasz fellépése is termikusan aktivált folyamatokkal függ össze, s így a IV. szakaszt nyilvánvalóan nem figyelhették meg.

A 6. 2. pontban látni fogjuk, hogy ebben a szakaszban a feszültség-deformáció összefüggés szintén parabolikus, de paraméterei a III. szakasztól eltérőek. Ebből, valamint az ellenállásváltozás (69) alakjából rögtön következik, hogy itt az ellenállásváltozás nem lehet arányos a plasztikus munkával. Ezt a következtetést előző megfigyelések is alátámasztják, amelyek szerint a plasztikus munkával való arányosság kb. $\gamma = 0,8$ -ig érvényes [39, 42].

5.5. Az előzetes hőkezelés hatása

A szemcsehatárok szerepének vizsgálatára méréseket végeztünk különböző előzetes hőkezelésű mintákon is. A 12. ábrák mutatnak egy-egy példát rézre és ezüstre. Látható, hogy a három szakasz kialakulását az előzetes hőkezelés, tehát a szemcseméret, nem befolyásolja. Az egyes szakaszokhoz tartozó $\Delta\varrho_i$ és γ_i paraméterek értékei megváltoznak, de a görbék jellege ugyanaz marad. Az ábrából világosan kitűnik, hogy a különböző hőkezelésű mintákon lényeges eltérés a II. szakaszban lép fel. Az ellenállásváltozás induló meredeksége jóval nagyobb a kevésbé hőkezelt mintákra. Ennek eredményeként a III. szakasz elérésekor már meglevő ellenállásváltozás nagyobb mint a jobban hőkezelt esetben, s ennek tulajdonítható a görbék egymáshoz képesti eltolódása.



12. (a, b) ábra. Előzetes hőkezelés hatása az alakváltozási folyamat szakaszaira réz és ezüst esetén
 12 c ábra. Előzetes hőkezelés hatása az alakváltozási folyamat IV. szakaszára réz és ezüst esetén

A 12a és c ábrák egyértelműen mutatják, hogy a III. és IV. szakaszban végbe-menő változásra jellemző $\Delta\varrho_{III}$ és $\Delta\varrho_{IV}$ paraméterek értéke (4. táblázat) független az előzetes hőkezeléstől. Ez érthető is, mert a III. és IV. szakasz kialakulása meghatározott hibastruktúra esetén következik be, s az ehhez vezető előzetes folyamatra van csak a hőkezelésnek jelentős hatása.

Mindezekből rögtön következik, hogy ha az anyagnak valamilyen előéletől független tulajdonságát (pl. a diszlokációk ellenállását) akarjuk vizsgálni, akkor a nagy deformációk hatását kell vizsgálnunk. Ez a megállapítás jól érzékelteti a csavarási deformáció alkalmazásának jelentőségét.

Meggondolásaink arra is egyszerű magyarázatot adnak, hogy miért különböznek egymástól lényegesen az irodalomból ismert eredmények [34]. Az alkalmazott előzetes hőkezelések általában különbözők. Emellett további nehézségeket okoz az, hogy jól definiált hőkezelési folyamat is csak azonos tisztaságú mintákon eredményez azonos előéletet. A különböző vizsgálatokban az anyagok szennyezettsége pedig általában jelentősen különbözhet. Ezért a szennyezések szerepét is figyelembe kell vennünk.

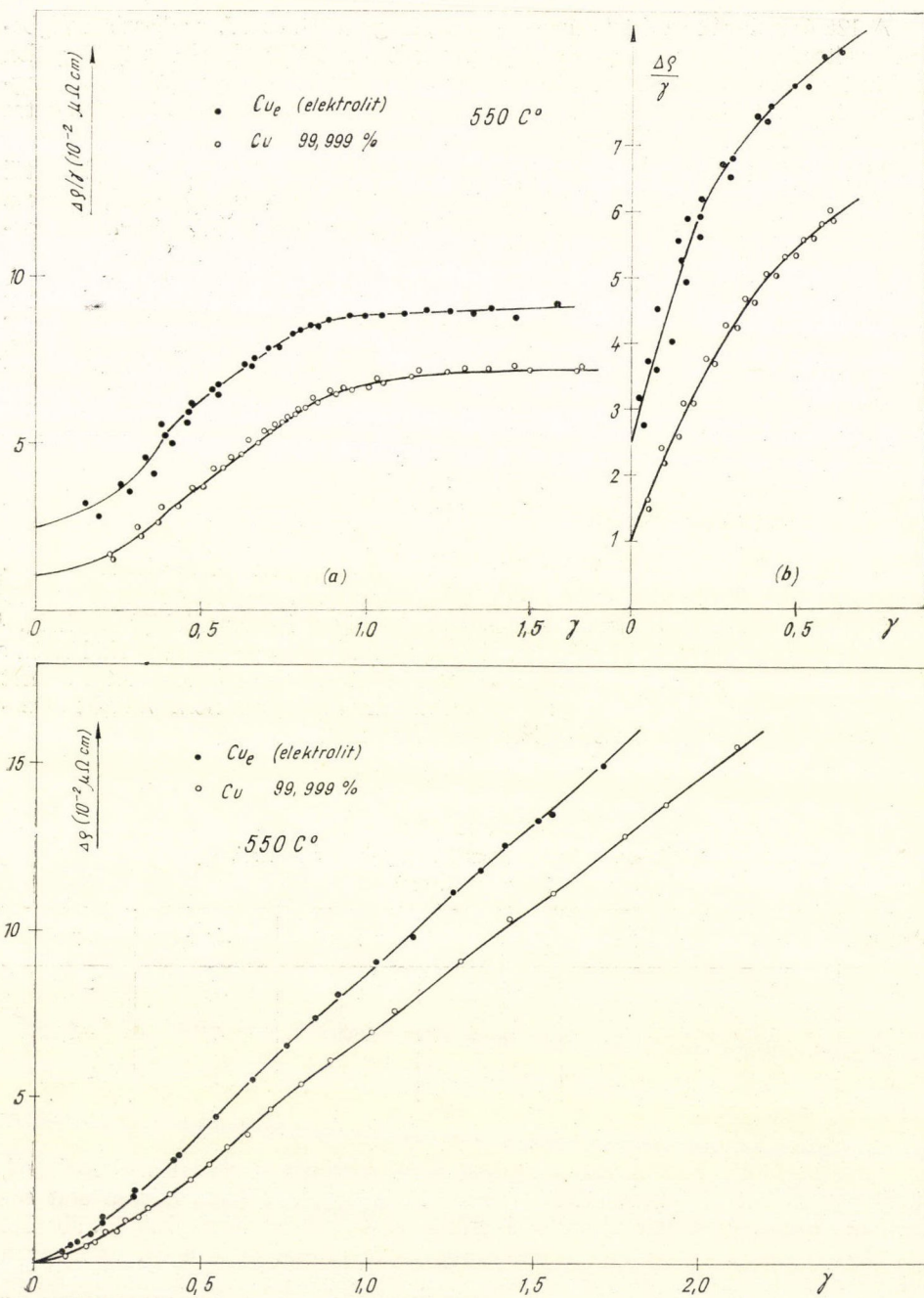
5.6. A szennyezések hatása

A szennyezések szerepének figyelembe vétele a képlékeny alakváltozás mechanizmusában és általában a rácshibákra való hatásukban a probléma legnehezebb kérdései közé tartozik. Jól ismeretes, hogy ugyanolyan koncentrációjú, de különböző minőségű szennyezések hatása az alapanyag tulajdonságaira nagyon különböző lehet. Még a „legtisztább” anyagok sem hasonlíthatók össze minden esetben, mert a „tisztaságuk” csak néhány alkotóra ismeretes általában, s a nem vizsgált összetevők különbözősége eltérő viselkedést eredményezhet.

4. TÁBLÁZAT
550 °C-on 3 órát hőkezelt anyagok paraméterei,
(10^{-8} ohm. cm)

Anyag	$\Delta\varrho_{II}$	γ_{II}	$\Delta\varrho_{III}$	γ_{III}	$\Delta\varrho_{IV}$	γ_{IV}
Ag	19,0	0,16	14,5	0,02	12,0	-0,18
Cu	23,0	0,044	11,5	0,0	7,7	-0,22
Cu _e	32,8	0,08	11,5	0,22	9,0	-0,04

Nem kívánunk foglalkozni a szennyezések szerepének részletes elemzésével, csupán egy példát mutatunk két különböző tisztaságú, 550 °C-on három órát hőkezelt réz viselkedésére (Cu, *Johnson* és *Matthey*, Cu_e elektrolit réz). A 13. ábrából látható, hogy legnagyobb mértékben a szennyezések hatása is a II. szakaszban mutatkozik. Érdekes azonban, hogy míg a III. szakaszban a $\Delta\varrho_{III}$ paraméter értéke nem különbözik a tiszta anyagétól, addig az igen nagy deformációknál mérhető $\Delta\varrho_{IV}$ igen (13a, c ábra, 4. táblázat).



13. (a, b) ábra. Szennyezés hatása az alakváltozási folyamat szakaszaira réz esetén
 13 c. ábra. Szennyezés hatása réz alakváltozási folyamatának IV. szakaszára

6. Az alakítási keményedés folyamatának vizsgálata

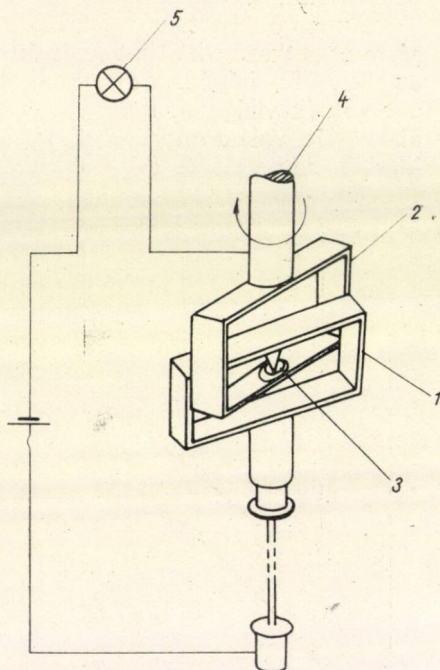
6.1. A kísérleti berendezés leírása

A folyási feszültség-deformáció összefüggés meghatározására végzett méréseinknek a 3. 3. pontban leírt elv képezte az alapját. Mint láttuk a forgatónyomaték vizsgálatával a feszültség-deformáció összefüggés közvetlenül mérhető. A következőkben ismertetett méréseket azonban a (61) formulával definiált relatív feszültségre vonatkozóan végeztük. Bár a deformáció kezdeti szakaszában (2—3%) a rugalmassági modulus jelentősen megváltozik [45], az általunk vizsgált tartományban azonban a relatív mérésekből kapott feszültség görbe nem különbözik észrevehetően a forgatónyomaték, vagy nyújtás mérésekből kapottól [25, 27, 42, 45, 46].

A csavarási deformáció során a rugalmas visszacsavarodás szöge jól mérhető az 5. ábrán vázolt berendezésben, a következő módosítás alkalmazásával. A vizsgálandó mintát rögzítő fejet nem közvetlenül csatlakoztatjuk a csavaró tengelyhez, hanem a 14. ábrán látható tütengelyes áttétellel. A tütengelyen fellépő súrlódási erő olyan kicsiny, hogy a minta rugalmas elcsavarodástól mentes egyensúlyi helyzete néhány tized foknyi pontossággal meghatározható. A vizsgált tartományban a plasztikus folyás utáni rugalmas visszacsavarodás szöge általában 20° — 150° tartományra terjed ki, tehát a relatív feszültség mérési pontossága igen jó.

A visszacsavarodási szög észlelése a berendezés termosztátba való helyezésekor elektromos úton történik a következőképpen. A tütengely 2. kereten elhelyezett támasztólapja elektromosan szigetelve van a kerettől. Az ábrán rajzolt áramkör ezért csak akkor zárt, ha az 1. és 2. keret érintkezik. Mérés során a csavaró tengely visszaforgatásakor az 1. keret mindaddig érintkezik a 2.-vel, amíg a rugalmas feszültségek a mintát visszaforgatják. Az egyensúlyi helyzet elérésekor ez a hatás megszűnik, s a 2. keret elválk az 1.-től. Az áramkör megszakadását az 5. izzólámpa jelzi.

A vázolt eljárás nagyon egyszerű és mégis pontos módszert jelent a feszültség-deformáció összefüggés meghatározására. Természetesen hangsúlyoznunk kell, hogy az alkalmazott tengelymenti feszültség, amely a minta egyenletes nyúlását biztosítja, nem haladta meg méréseinkben a kezdeti (hőkezelés utáni) folyáshatár 20—30%-át. Ezért a vizsgált tartományban a folyást kialakító feszültség gyakorlatilag csak a csavarásból származik.

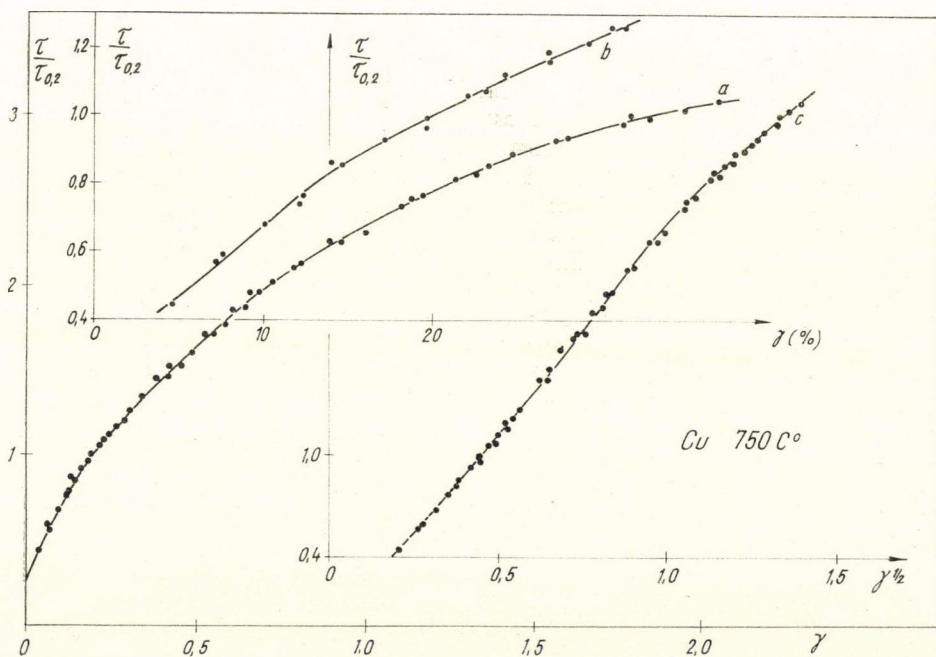


14. ábra. A rugalmas visszacsavarodás mérésére szolgáló berendezés sematikus rajza

6.2. Mérési eredmények

A tűtengely beiktatása a minta ellenállásváltozásának mérését nem befolyásolja, ezért a két vizsgálat egyidejűleg elvégezhető. Ennek ellenére összetartozó folyási feszültség-ellenállásváltozás adatpárokat nem kaphatunk, mert egy adott mértékű csavarás után mért folyási feszültség a minta kerületén kialakult deformációhoz tartozik, az ellenállásváltozást pedig a mintában keletkező átlagos deformáció szabja meg. Ez azonban nem változtat azon a tényen, hogy a két egymástól lényegesen különböző sajátság ugyanazon mintán, egyidejűleg mérhető.

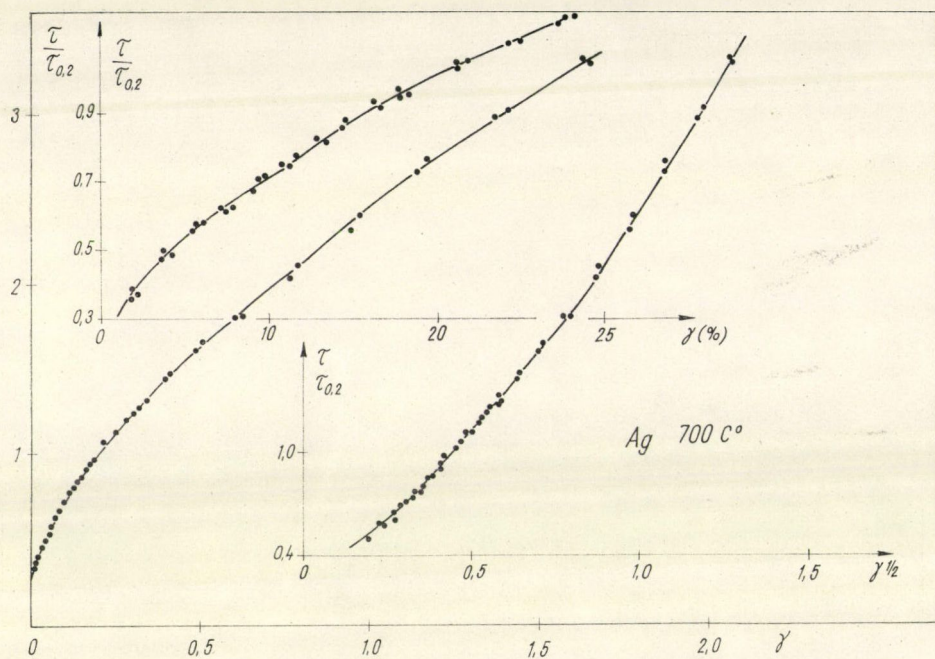
Az előző fejezetben az ellenállásmérések alapján tett megállapításokat a feszültségre vonatkozó vizsgálatok egyértelműen alátámasztják. A mérések eredményeit az ellenállásméréseknek megfelelő mintákon a 15–21. ábrákon adtuk meg. Ezeken a e görbék világosan mutatják az alakváltozási folyamat három szakaszának kialakulását. Valamennyi esetben a feszültség-deformáció összefüggés a II. szakaszban lineáris, míg a III. és IV. szakaszban parabolikus.



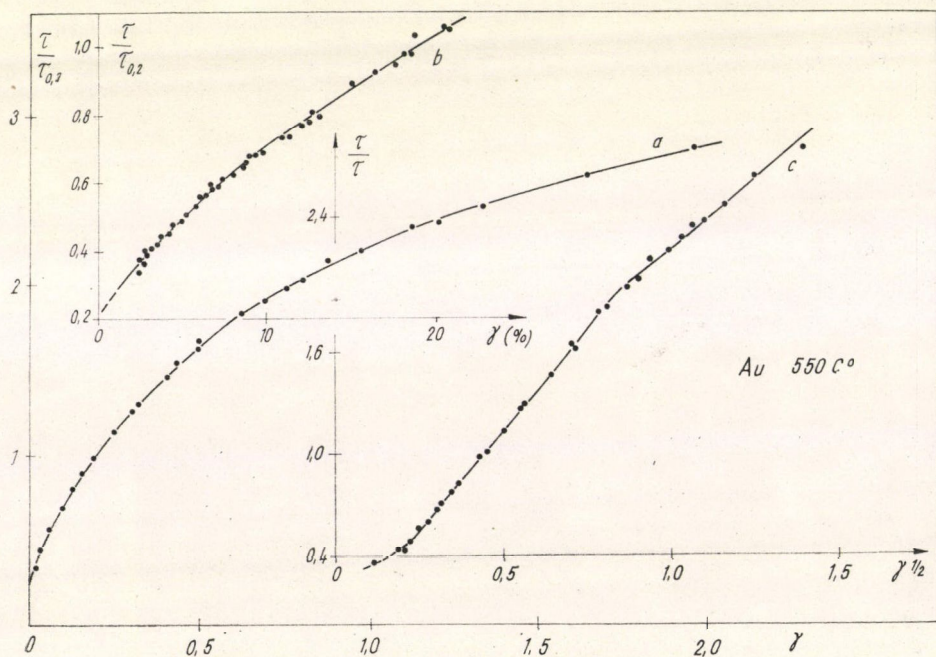
15. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 750 C°-on hőkezelt réze. Az alakváltozási folyamat három szakasza valamennyi ilyen típusú görbéből is egyértelműen kitűnik

Forgatónyomaték mérések segítségével a $\tau_{0,2}$ feszültségérték meghatározható, és így az egyes szakaszok (66), (67) egyenleteiben szereplő paraméterek megadhatók.

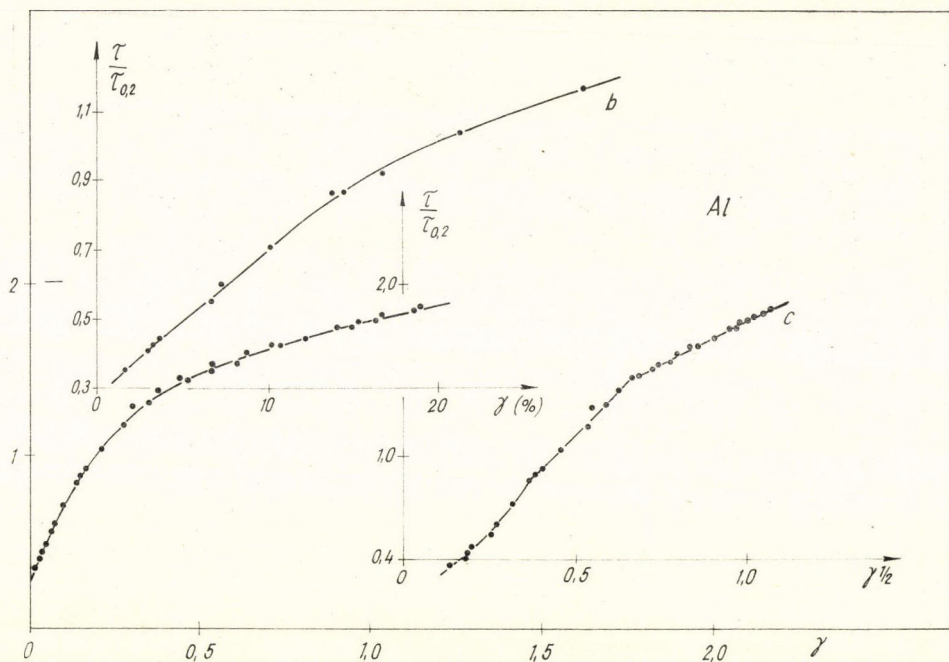
Ezeket az adatokat az 5. táblázatban foglaltuk össze. A 3. és 4. táblázat adataival való összehasonlítás kétségtelenül bizonyítja az ellenállásváltozás-plasztikus munka arányosságot a II. és III. szakaszban.



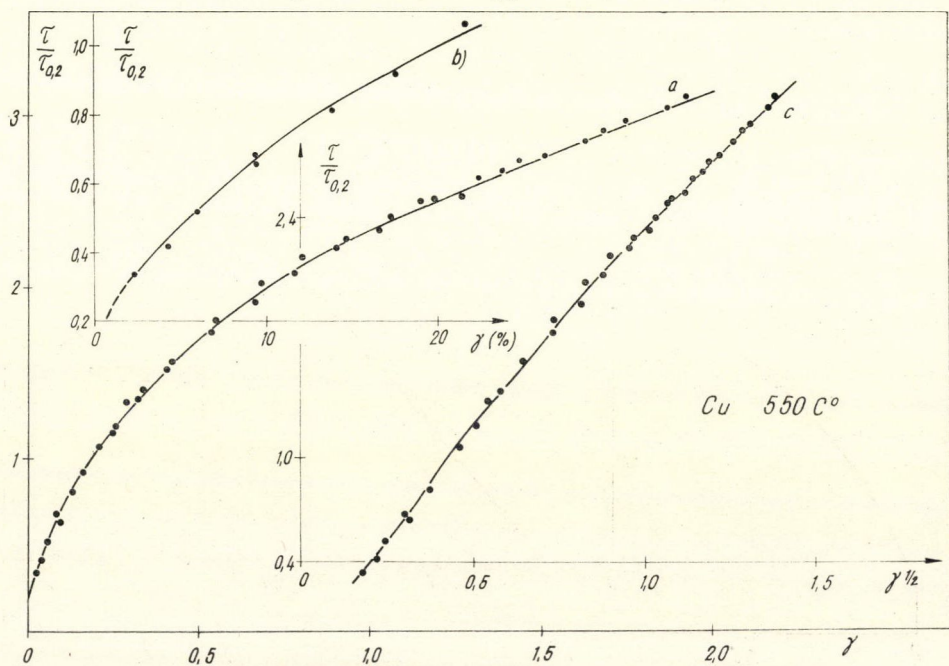
16. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 700 C°-on hőkezelt ezüstre



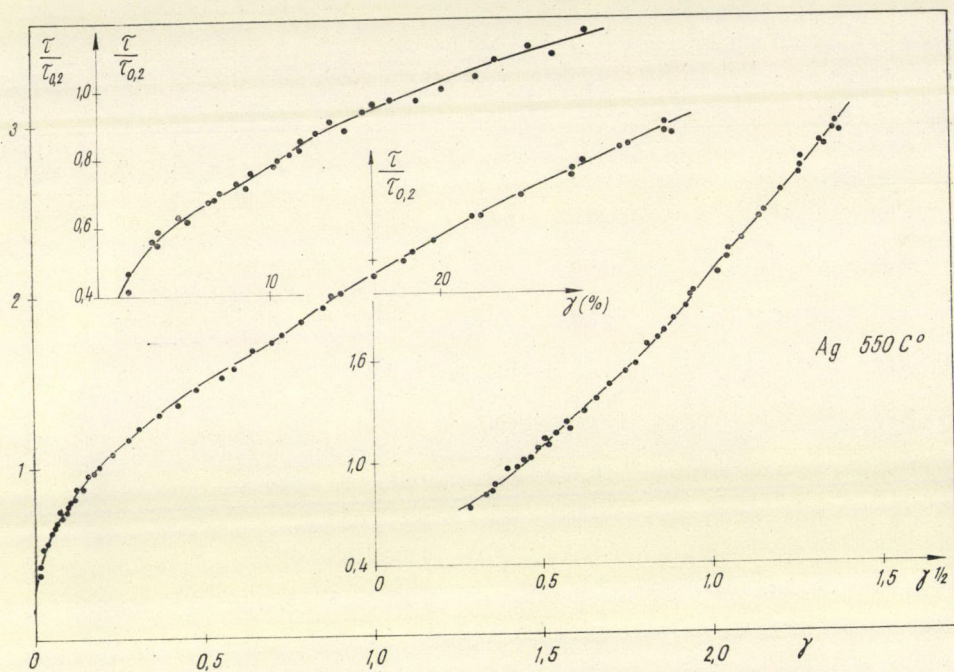
17. ábra. Feszültség -deformáció összefüggés 550 C°-on hőkezelt aranyra



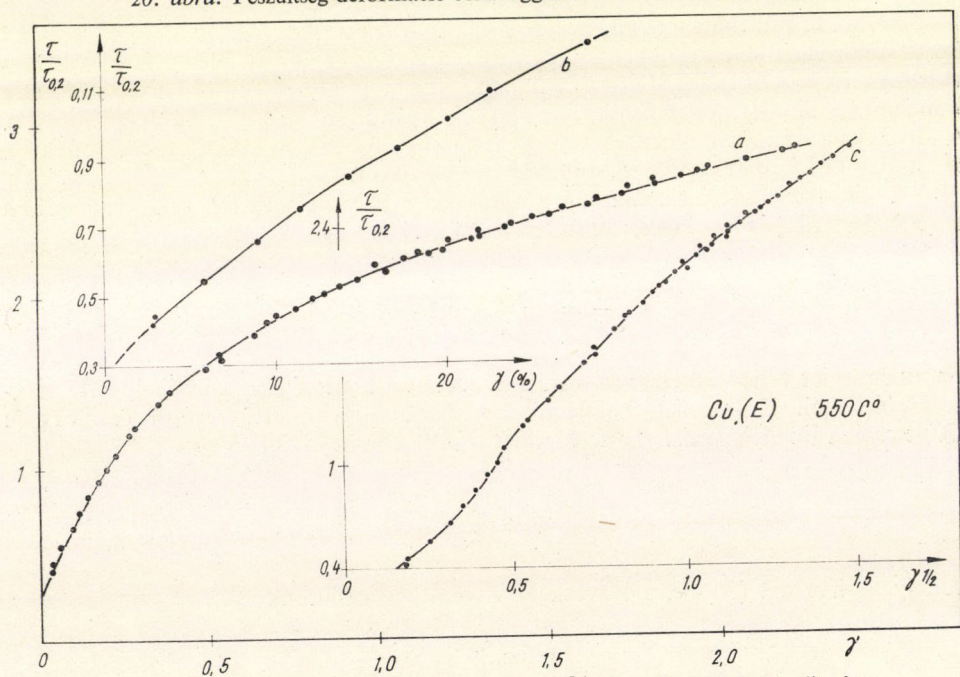
18. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 500 C°-on hőkezelt alumíniumra



19. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 550 C°-on hőkezelt rézre



20. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 550 C°-on hőkezelt ezüstre



21. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés 550 C°-on hőkezelt elektrolit rézre

5. TÁBLÁZAT

Folyási feszültség-deformáció összefüggések paraméterei
 μ , χ és $\tau_{0,2}$ kg/mm²-ben

Anyag	χ_{II}	γ_{II}	χ_{III}	γ_{III}	χ_{IV}	γ_{IV}	$\tau_{0,2}$	μ	b (10 ⁻⁸ cm)
Cu ₇₅₀	41,5	0,04	20,2	-0,08	14,6	0,35	8,1	4,0	2,55
Ag ₇₀₀	33,0	0,10	23,0	-0,06	29,0	-0,23	9,2	3,0	2,88
Au ₅₅₀	46,5	0,045	21,7	-0,01	12,8	0,38	8,9	2,6	2,87
Al ₅₀₀	25,0	0,062	11,9	0,05	5,8	0,79	5,8	2,7	2,86
Ag ₅₅₀	33,0	0,158	22,0	0,02	25,9	-0,13	10,8		
Cu ₅₅₀	41,5	0,046	20,4	0,0	16,9	0,17	8,6		
Cu _{e 550}	41,5	0,08	21,8	0,07	15,4	0,48	10,6		

7. Az eredmények diszkussziója

7.1. Az alakítási keményedés folyamatára levonható következtetések

A 2. 3. 5. pontban tett megfontolásaink, az előző két fejezet alapján, a kísérletek során igazolást nyertek. Röviden összefoglalva ez annyit jelent, hogy az alakváltozási folyamat II. és III. szakaszában mind a ponthibák, mind a diszlokációk koncentrációjának növekménye a plasztikus munka megváltozásával arányos. A diszlokációkra vonatkozó ezen összefüggésből fontos következtetések vonhatók le az alakítási keményedés folyamatára vonatkozóan.

A kísérletek szerint tehát az alakváltozási folyamat II. és III. szakaszában a (30) összefüggés érvényes, azaz

$$b^2 \frac{dN}{d\gamma} = A_d \frac{\tau_r}{\mu}, \quad 0,2 < \gamma < 0,8. \quad (70)$$

Ez az egyenlet teljes egyezésben van a 2. 3. 4. pontban végzett dimenzionális megfontolásokkal. Egyszerűen belátható azonban, hogy a (17) típusú összefüggés (70)-t csak a lineáris szakaszban elégítheti ki. Ekkor ugyanis

$$d\gamma = \frac{1}{\Theta_{II}} d\tau_r.$$

Behelyettesítve ezt (70)-be, a következő összefüggésre jutunk

$$\tau_r = \left(\frac{2\Theta_{II}}{A_d \mu} \right)^{1/2} \mu b N^{1/2}, \quad (71)$$

ami éppen a (17) kifejezés. Eredményünkéből a (17)-ben bevezetett arányossági tényező értéke is megadható

$$\alpha = \left(\frac{2\Theta_{II}}{A_d \mu} \right)^{1/2}. \quad (72)$$

Ebből pl. réz esetén a $\Theta_{II} = \frac{\chi_{II}}{\sqrt{3}}$ összefüggéssel az 5. táblázat alapján $\alpha = 0,49$ adódik,

ami igen jól egyezik az elméleti értékkel (2. 3. 4. pont).

A (70) és (71) összefüggés egyidejűleg tehát csak a II. szakaszban állhat fenn. Ez azt is jelenti, hogy a (17) típusú egyenlet a parabolikus szakaszra nem érvényes. Ez az oka annak, hogy a 2. 3. 4. pontbani (22) feltevésünk az $l_s = \text{állandó}$ következtetésre vezetett.

A (70) egyenlet érvényessége ezzel szemben a (27) feltevést igazolja, s ez fizikailag nyilvánvalóan meggyőzőbb eredmény.

A parabolikus szakaszban a folyási feszültség és diszlokáció sűrűség közti összefüggés becslésére használjuk fel a kísérletileg észlelhető összefüggést, mely szerint

$$\tau_r = \tau_0 + \chi_r \gamma^{1/2}. \quad (73)$$

Ezzel (70)-ből integrálás után

$$b^2 N = \frac{2A_d}{3\mu\chi_r^2} \tau_r^3 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{\tau_0}{\tau_r} \right). \quad (74)$$

Ebből közelítőleg a következő összefüggés nyerhető

$$\tau_r \cong \left(\frac{3}{2} \frac{\chi_r^2}{A_d \mu^2} \right)^{1/3} \mu b^{2/3} N^{1/3}. \quad (75)$$

A (71) és (75) egyenletek szemléletes fizikai tartalmat fejeznek ki. A (70) összefüggés meghatározásakor a 2. 3. 4. pontban feltételeztük, hogy az átlagos szabad úthossz (l_s) arányos a mozgó diszlokáció által metszendő „erdő” diszlokációinak átlagos távolságával (l), a csúsztató feszültség pedig ezekkel fordítva arányos. (71) illetve (75) összehasonlítása (27)-tel azt mutatja, hogy a lineáris szakaszban az $l_s^{-1} \alpha N^{1/2}$, míg a parabolikus szakaszban az $l_s^{-1} \alpha N^{1/3}$ összefüggés teljesül.

Ezek fizikai tartalma a következő. A lineáris szakaszban a csúszás csak a legkedvezőbb orientációjú csúszási síkokban folyik, ezért a diszlokációk eloszlása két dimenziós. Ekkor a diszlokáció-sűrűséget úgy kell értelmeznünk, mint a felületegységet merőlegesen döfő diszlokációvonalak számát. Az átlagos távolságuk ekkor annak a négyzetnek az oldaléle, amelyen átlagosan egy diszlokáció halad át. Ha a diszlokációvonalra merőleges felületegységen N diszlokáció halad keresztül, akkor egy ilyen négyzet oldaléle $N^{-1/2}$.

A III. szakasz mint már említettük, a diszlokációk termikusan aktivált keresztcsúszásával függ össze. Ennek eredményeként a csúszás már nem csak a legkedvezőbb orientációkban megy végbe, hanem gyakorlatilag minden lehetséges csúszási irányra kiterjed. Ennek következményeként a diszlokációk eloszlása térfogatívá, és legáltalábbis makroszkopikus szempontból, minden irányban egyenletessé válik. Ezért ekkor adott irányú diszlokáció vonalak átlagos távolsága azon kocka élhosszával lesz egyenlő, amelyben összesen 1 cm hosszú, három egymásra merőleges irányú szakaszból összetett diszlokációvonal van. Egy ilyen kocka oldaléle pedig $N^{-1/3}$.

Ebben az esetben a diszlokációsűrűséget a térfogategységben levő diszlokációvonalak hosszával értelmezzük. Ezzel szemléletes jelentést adtunk a (71) és (75) összefüggésnek a (27) feltevéssel összhangban.

A IV. szakasz tulajdonságaira vonatkozóan jelenleg nem sokat lehet mondani. Az itt kialakuló folyamatok megismeréséhez még további vizsgálatok szükségesek.

7.2. A diszlokációk ellenállása

Eredményeink lehetőséget nyújtanak arra, hogy a vizsgált fémekben a hosszegységnyi diszlokáció által okozott ellenállásváltozást meghatározzuk. Figyelembe véve a (45) összefüggést (66) és (67) felhasználásával (70)-ből a következő összefüggésekre jutunk

$$\left. \frac{dN}{d\gamma} \right|_{II} = \frac{A_d}{\mu b^2 \sqrt{3}} \chi_{II} (\gamma_{II} + \gamma), \quad (76)$$

illetve

$$\left. \frac{dN}{d\gamma} \right|_{III} = \frac{A_d}{\mu b^2 \sqrt{3}} \chi_{III} (\gamma_{III} + \gamma^{1/2}). \quad (77)$$

Másrészt (65) és (68)-ból

$$\left. \frac{d(\Delta Q)}{d\gamma} \right|_{II} = \Delta Q_{II} (\gamma_{II} + \gamma), \quad (78)$$

és

$$\left. \frac{d(\Delta Q)}{d\gamma} \right|_{III} = \Delta Q_{III} (\gamma_{III} + \gamma^{1/2}). \quad (79)$$

Ezen utóbbi négy egyenletből

$$\left. \frac{d(\Delta Q)}{dN} \right|_i = \frac{\mu b^2 \sqrt{3} \Delta Q_i}{A_d \chi_i}, \quad (i = II, III). \quad (80)$$

Mivel a diszlokációk és ponthibák által okozott ellenállásváltozás arányát méréseinkből megállapítani nem tudjuk, ezért az irodalomban szokásos feltevést tesszük, mely szerint az összes ellenállásváltozás fele származik a diszlokációktól és fele a ponthibáktól. Ezzel a (80) egyenletből a hosszegységnyi diszlokáció ellenállását megbecsülhetjük. Figyelembe kell vennünk azonban, hogy a II. szakaszban az ellenállásváltozás függvénye az előzetes hőkezelésnek és a szennyezésnek, míg a III. szakaszban ezektől ΔQ_{III} és χ_{III} egyaránt gyakorlatilag független (3., 4. és 5. táblázat). Ezért a számítást a III. szakasz paramétereivel végezzük el, tehát ($A_d = 0,05$)

$$Q_d = 0,173 \mu b^2 \frac{\Delta Q_{III}}{\chi_{III}}. \quad (81)$$

Az 5. táblázatban megadott μ és b értékekkel kapott adatokat a 6. táblázat tartalmazza, elméleti összefüggésből számított értékekkel együtt. Látható, hogy az elméleti és kísérleti eredmények igen jól egyeznek, különösen ha figyelembe vesszük, hogy a diszlokációk ellenállása a hőmérsékletnek is függvénye, tehát a Matthiessen szabály csak közelítőleg teljesül [47]. Megjegyzendő még, hogy eredményeink előző kísérleti adatokkal is jól egyeznek [47].

Végül adhatunk egy becslést a ponthibák által átlagosan okozott ellenállás-változásra is. A (33) egyenletből a ponthibakonzentráció növekménye (b^{-3} -nal való osztás után)

$$dc_p = \frac{A_p b^2}{A_d} dN. \quad (82)$$

6. TÁBLÁZAT

Diszlokációk és ponthibák fajlagos ellenállása

Anyag	$\varrho_d (10^{-19} \text{ ohm. cm}^3)$		$10^{-6} \text{ ohm. cm/at\%}$		10^{-4}	
	Elméleti	Kísérleti	ϱ_p	$\varrho_{\text{vakancia}}$	$\frac{n_p}{n}$	$\frac{n_v}{n}$
Cu	2,0	2,6	0,56	1,5	5,2	2,0
Ag	2,2	2,8	0,65	1,6	5,7	1,7
Au	2,8	3,3	0,67	1,7	7,0	7,2
Al	4,7	4,4	0,90	2,2	3,5	9,0

Ennek felhasználásával az atomszázaléknyi ponthibakonzentráció ellenállása a következőképpen adható meg

$$\varrho_p = \frac{1}{2} \frac{d(\Delta\varrho)}{dc_p} 10^{-2} = \frac{A_d \varrho_p}{A_p b^2} 10^{-2}.$$

Az $A_d = 0,05$, $A_p = 0,3$ értékekkel

$$\varrho_p = \frac{5}{3} \frac{\varrho_d}{b^2} 10^{-3}.$$

Az ebből számított adatokat is a 6. táblázat tartalmazza. A vakanciák ellenállására megadott irodalmi adatokkal [48, 49, 50] való összehasonlítás mutatja, az átlagos ponthiba ellenállás kisebb mint a vakanciáké. Ez annak következménye, hogy a deformáció során keletkező igen nagyszámú, különféle ponthiba (vakancia, intersticiális atom) párokba és különböző nagyobb csoportokba épül össze. Ennek eredményeként a rács átlagos torzulása, s ezzel együtt a hibák eredő szóróképessége is csökken.

Végül inkább csak érdekességként a következőket szeretnénk megjegyezni. Ha megbecsüljük az átlagos ponthiba ellenállásra kapott adatok alapján a III. szakasz végén ($\gamma = 0,8$) mért ellenállás-változásból az ekkor meglevő n_p/n ponthibakonzentrációt, akkor ennek nagyságrendje az olvadáspontonál mért vakancia-konzentrációval [48] esik össze (n_v/n , 6. táblázat). Ez azt jelenti, hogy ekkora deformációknál az anyag a ponthibakonzentráció szempontjából a folyadék állapotot közelíti meg. Mivel kevésbé tűnik valószínűnek, hogy az olvadásponti koncentrációt a vakanciák ilyen alacsony hőmérsékleten meghaladják (és a keletkező ponthibák jelentős része vakancia), ezért várható egy olyan folyamat kialakulása, amely a ponthiba termelést valamilyen módon leállítja. Talán éppen ez a jelenség adja a IV. szakasz megjelenésének magyarázatát.

Összefoglalás

Felületcentrált köbös, polikristályos fémek alakváltozásának mechanizmusát vizsgáltuk. A dolgozat célja a csavarási deformáció módszerének kiépítése, a módszerrel nyerhető kísérleti eredmények ismertetése, valamint ezek értelmezése volt. A tárgyalt kérdések az alábbi pontokban foglalhatók össze:

1. Megállapítottuk a sugártól függő torziómoduluszú ($\mu = \mu/r$) rugalmasan megcsavart hengeres test egyensúlyának feltételét.

2. Áttekintést adtunk a képlékeny testek alapvető fenomenológiai tulajdonságairól, továbbá a reális anyagok képlékenységében legfontosabb szerepet játszó kristályhibák sajátosságairól.

3. Áttekintve az egykristályok alakítási keményedésére és a hibakoncentráció növekedésére vonatkozó elméleteket, megállapítottuk a ponthiba és diszlokáció koncentráció változásának a plasztikus munka növekményével való arányosságát.

4. Statisztikus megfontolásokkal egyszerű úton meghatároztuk a polikristályokra vonatkozó Taylor faktor értékét.

5. Összefüggést állapítottunk meg a polikristályos fémek egyidejű plasztikus csavarása és nyújtásakor fellépő összes nyírás, valamint a makroszkopikusan mérhető alakváltozás között, mely szerint

$$\gamma = \frac{2}{3} \int_0^{\theta} \frac{ad\theta}{l} + 3 \frac{\Delta l}{l_0}.$$

6. Megadtuk az elvi alapjait a folyási feszültség-deformáció összefüggés mérésének csavarási deformáció során, az 1. pontban nyert eredmény felhasználásával.

7. Mérési módszert adtunk meg a csavarási deformáció során fellépő ellenállásváltozás mérésére és kísérletileg igazoltuk az 5. pont alatti összefüggést.

8. Mérési módszert adtunk meg a feszültség-deformáció görbe alakjának meghatározására nem túl kis deformációk esetén.

9. Az elektromos ellenállás és folyási feszültség mérések alapján a 3. pont eredményeinek felhasználásával megmutattuk, hogy az alakváltozás folyamata a $\gamma > 0,02$ tartományban három szakaszra osztható. Ezek közül az első kettő az egykristályokon megfigyelt II. (lineáris) és III. (parabolikus) szakasszal egyezik meg. Az ezután következő, szintén parabolikus szakaszt az irodalomban eddig még nem észlelték.

10. A 9. pont eredményei szerint az alakváltozás II. és III. szakaszában a folyási feszültség és a diszlokációsűrűség között a következő összefüggés áll fenn;

$$b^2 \frac{dN}{d\gamma} = A_d \frac{\tau_r}{\mu}$$

Ebből következik, hogy az alakváltozás III. szakaszában az irodalomban általánosan alkalmazott (valójában csak a II. szakaszra érvényes) $\tau_r \alpha N^{1/2}$ összefüggés helyett a $\tau_r \alpha N^{1/3}$ érvényes.

11. A kísérleti eredmények azt mutatják, hogy az alakváltozás harmadik szakaszát jellemző $\Delta \varrho_{III}$ és χ_{III} paraméterek az előléteitől és a szennyezéstől gyakorlatilag

függetlenek. Ezek felhasználásával megbízható becslést adhatunk a diszlokációk ellenállására a következő összefüggés alapján

$$\varrho_d = 0,173 \mu b^2 \frac{\Delta \varrho_{III}}{\chi_{III}}.$$

Az eredmények jól egyeznek előző kísérleti és elméleti adatokkal.

Köszönetnyilvánítás

E helyen is szeretném hálás köszönetemet kifejezni *Dr. Nagy Elemér* professzor úrnak eddigi munkámhoz nyújtott sok segítségével és bátorításáért. Bizonyos vagyok benne, hogy támogatása nélkül e munka nem született volna meg.

Köszönetet szeretnék mondani továbbá *Kovács Apollónia, Fónyad Árpád, Rostás János, Bársony István* és *Nagy Erzsébet* volt fizikus hallgatónak, akik diplomamunkájukban a mérések jelentős részét elvégezték.

IRODALOM

1. *Kovács István*, Kandidátusi disszertáció 1966.
2. *Truesdell and W. Noll*, Handbuch der Physik, III/3. Springer Verlag, Berlin, 1965. p. 101.
3. *W. Prager és P. G. Hodge*, Tökéletesen képlékeny testek, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965. 32. o.
4. *R. von Mises*, Z. angew. Math. Mechn. 8, 161, 1928.
5. *H. Tresca*, Mem. pres. par. div. sav. 18, 733, 1868.
6. *E. Schmid*, Proc. Internat. Congr. Appl. Mech. Delft, p. 342. 1924.
7. *Kovács István—Zsoldos Lehel*, Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
8. *J. Frenkel*, Z. Physik, 335, 652, 1926.
9. *J. K. Mackenzie*, Thesis, Bristol, 1949.
10. *Kovács István és Chatel Péter*, Magy. Fiz. Folyóirat, 14, 15, 1966.
11. *F. C. Frank and W. T. Read*, Phys. Rev. 79, 722, 1950.
12. *I. Kovács*, phys. stat. sol. 3, 140, 1963.
13. *G. I. Taylor*, Proc. Roy. Soc. A 145, 362, 1934.
14. *F. R. N. Nabarro, Z. S. Basinski and B. Holt*, The Plasticity of Pure Single Crystals, Adv. Phys. 13, 1964.
15. *G. Saada*, Thesis, Paris 1960.
16. *P. Feltham*, phys. stat. sol. 6, 235, 1964.
17. *H. R. Peiffer*, Acta Met. 11, 435, 1963.
18. *I. Kovács, E. Nagy and P. Feltham*, Phil. Mag. 9, 797, 1964.
19. *A. Seeger and H. Kronmüller*, Phil. Mag. 7, 897, 1962.
20. *J. W. F. Bishop and R. Hill*, Phil. Mag. 42, 1298, 1951.
21. *H. G. van Bueren*, Imperfections in Crystals, North Holland Publishing Company, Amsterdam 1960.
22. *J. H. Poynting*, Proc. Roy. Soc. 86, 534, 1912.
23. *Kovács Apollónia*, Diplomamunka, ELTE 1961.
24. *I. Kovács and E. Nagy*, phys. stat. sol. 3, 726, 1963.
25. *H. P. Stüwe*, Z. Metallkunde, 55, 699, 1964; 56, 633, 1965.
26. *A. Nádaí*, Theory of Flow and Fracture of Solids, 2d. ed. vol. I., p. 347, McGraw Hill Comp., Inc. New York 1950.
27. *I. Kovács and P. Feltham*, phys. stat. sol. 3, 2379, 1963.
28. *Kovács István és Balázs János*, Magy. Fizikai Folyóirat 13, 381, 1965.

29. *J. Molenaar* and *W. H. Aarts*, *Nature*, 166, 690, 1950.
60. *M. J. Druyvesteyn* and *J. A. Manintveld*, *Nature*, 168, 868, 1951.
31. *J. A. Manintveld*, *Nature*, 169, 623, 1952.
32. *J. A. Manintveld*, Thesis, Technical University Delft, 1954.
33. *W. H. Aarts* and *R. K. Jarvis*, *Acta Met.* 2, 87, 1954.
34. *H. G. van Bueren*, *Philips Res. Rep.* 12, 1, 1957.
35. *R. H. Pry* and *R. W. Henning*, *Acta Met.* 2, 318, 1954.
36. *H. G. van Bueren* and *P. Jongenburger*, *Nature*, 175, 543, 1955.
37. *H. R. Peiffer*, *Journ. App. Phys.* 34, 298, 1963.
38. *N. S. Akulov*, *Phil. Mag.* 9, 767, 1964.
39. *I. Kovács* and *E. Nagy*, *phys. stat. sol.* 8, 795, 1965.
40. *E. Nagy* and *I. Kovács*, *Reinstoffe in Wissenschaft und Technik* (sajtó alatt).
41. *I. Kovács*, *Acta Phys. Hung.* XV. 65. 1962.
42. *S. Ceresara*, *H. Elkholy* and *T. Federighi*, *phys. stat. sol.* 2, 509, 1965.
43. *G. Heussler*, személyes közlés.
44. *T. H. Blewitt*, *R. R. Coliman* and *J. K. Redman*, Report on the Conference on Defects in Crystalline Solids, The Physical Society, London, 1955. p. 369.
45. *Nagy Erzsébet*, Diplomamunka, ELTE, 1966.
46. *Bársony István*, Diplomamunka, ELTE, 1965.
47. *Z. S. Basinski*, *J. S. Dugdale* and *A. Howie*, *Phil. Mag.* 8, 1989, 1963.
48. *R. O. Simmons* and *R. W. Baluffi*, *Phys. Rev.* 129, 1535, 1963.
49. *A. Seeger*, Radiation Damage in Solids, International Atomic Energy Agency, Vienna 1962.
50. *M. Doyama* and *J. S. Koehler*, *Phys. Rev.* 134, A522, 1964.

AZ ALAPVETŐ KÖLCSÖNHATÁSOKKAL KAPCSOLATOS ÚJ EREDMÉNYEK A MAGSPEKTROSKÓPIÁBAN

BERÉNYI DÉNES

MTA Atommag Kutató Intézete, (ATOMKI)
Debrecen

1. Bevezetés

A világszerte folyamatban levő magspektroszkópiai kutatások egyik része elsősorban a magstruktúra földerítésével foglalkozik. Másik, méreteiben talán nem olyan nagy, de jelentőségben annál nagyobb rész a magspektroszkópia módszereivel és jelenségein keresztül az alapvető kölcsönhatások problematikus kérdéseit igyekszik tisztázni. Végül egy harmadik kutatási terület, amely mindkét előző szempontjából hasznos, maguknak az egyes magspektroszkópiai folyamatoknak (bomlások, elágazási viszonyok, másodrendű folyamatok stb.) a mechanizmusát, törvényszerűségeit igyekszik felderíteni.

Megjegyezzük itt, hogy a magszerkezet kutatásban is új út nyílt meg a „klasszikuson” kívül az utóbbi években. A régebbi és szokásosabb lehetőség, kimérni az egyes magnívók elhelyezkedését és paramétereit és ezeket összehasonlítani a magstruktúrára vonatkozólag tett ilyen vagy olyan feltevés alapján számított megfelelő értékekkel. Az újabb és mélyebb megismerési lehetőség viszont, amelyet részben éppen a béta-kölcsönhatás tisztázása tett lehetővé, az átmeneti mátrix elemek vizsgálata, amely a magállapot hullámfüggvényének közvetlenebb ellenőrzését jelenti.

Ennek a dolgozatnak a keretében a legutóbbi évek néhány olyan jelentős magspektroszkópiai eredményét szeretnénk bemutatni, amelyek fontosak az elemi kölcsönhatások fizikája, elsősorban a gyenge kölcsönhatások szempontjából.

2. Paritás-sértő kölcsönhatások nukleonok között

A gyenge kölcsönhatások jelenleg érvényben levő Gell-Mann—Feynman-féle ún. „áram-áram” elmélete szerint [1—6] feltételezünk egy ún. teljes gyenge áramot

$$J = (e^* \nu) + (\mu^* \nu_\mu) + (p^* n) + (p^* A) + \dots, \quad (1)$$

amelyből a kölcsönhatás Hamilton-operátorát a

$$H = g J^* J \quad (2)$$

kifejezés adja, amely minden lehetséges gyenge kölcsönhatási formát tartalmaz a béta-bomlástól a A -hiperon bomlásáig. Itt e, μ, p, A, ν, ν' , az elektron, a müon, a proton, a A -hiperon, az elektron- ill. müon-neutrino és az őket keltő ill. eltüntető tér-operátorok jelzése. A „ $*$ ” a Hermite-konjugáltat jelzi. Ha pl. e jelenti azt a teret, amelyik elektront kelt és pozitront eltüntet, akkor e^* az elektront tünteti el és a pozitront kelti.

* Érkezett 1966. jún. 27.

Az (1) és (2)-ből látható, hogy a gyenge kölcsönhatásokban részecske párok (egyik részecske töltött, a másik semleges): (νe) , $(\mu \nu_\mu)$ stb. lépnek kölcsönhatásba és pedig az eddig ismert esetekben különböző részecske párok. Pl. az $(\nu e) - (pn)$ a béta-bomlásban (a „lepton-áram” és a „nukleon áram” kölcsönhatása), $(\nu e) - (\mu \nu_\mu)$ a müon bomlásban stb. Az elméletből azonban várható azonos párok kölcsönhatásának a fellépte is, mint pl. $(\nu e) - (\nu e)$ vagy $(pn) - (pn)$. Ezek kimutatása igen fontos az elmélet érvényessége szempontjából.

Az $(\nu e) - (\nu e)$ kölcsönhatás vizsgálata neutrino-elektron szórás kísérletekben történhetne [2]. Ezek azonban kísérletileg igen nehéznek látszanak. A Columbia egyetemen végeztek ilyen irányú előzetes kísérleteket és számításokat [7]. Az eredmények azt mutatták, hogy legalábbis egyelőre ezen a téren nem sokat várhatunk.

A másik lehetőség a $(pn) - (pn)$ kölcsönhatások, azaz a nukleonok közötti paritássértő kölcsönhatás kimutatása. Elméleti számításokból következik, hogy paritássértés megjelenése, a nukleonok közötti erős kölcsönhatásokban is várható, erőssége azonban csak $F^2 \sim 10^{-24}$ lenne [8]. Az „áram-áram” elmélet alapján várható nem leptonos kölcsön hatás (tehát olyan, amelyikben leptonok nem vesznek részt) erőssége viszont sok nagyságrenddel nagyobb: $F^2 \sim 10^{-12}$. F itt a paritássértő hullámfüggvény relatív amplitúdója a paritást megőrzőhöz képest [9]:

$$\psi = \psi_{pm} + F\psi_{ps}.$$

Az F^2 a paritássértő nukleon-nukleon erők erősségének a mértéke.

Végeredményben tehát arról van szó, hogy meg kell vizsgálnunk különböző nukleonok közötti kölcsönhatásokban, mag-átmenetekben a paritássértés felléptét és relatív intenzitását. Michel [10] legutóbbi felmérése szerint ilyen lehetőségek elsősorban az alfa-, béta- és gamma-átmenetekben kínálóznak, de a termikus neutron szórási kísérletek is ígéretesek. A szóban forgó munkában konkrét magokig, ill. átmenetekig terjedő javaslatok is vannak a mérésekre vonatkozóan.

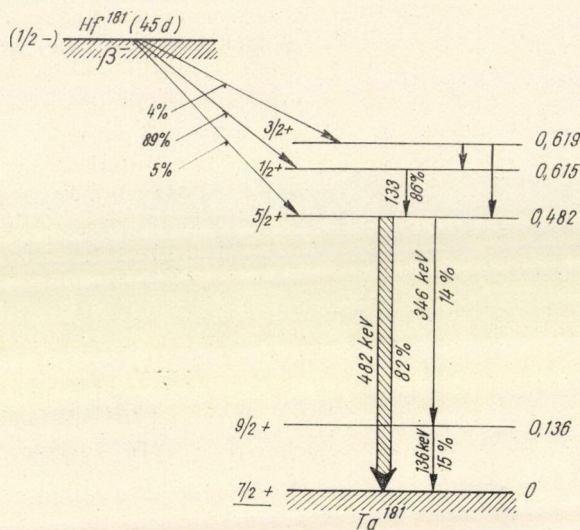
Az 1964-es párizsi konferencia legnagyobb eseménye volt ennek a nukleonok közötti nem leptonos gyenge kölcsönhatásoknak, — vagy más megfogalmazásban — a paritássértésnek a kimutatása magátmenetekben. Két egymástól független és más típusú kísérletről számoltak be, amely ezt bizonyította. Az egyiket a Californiai Műegyetemen (Boehm és Kankleit) [11], a másikat a moszkvai Elméleti és Kísérleti Fizikai Intézetben végezték el (Abov és munkatársai) [12, 13].*

Boehm és Kankleit a Ta^{181} 482 ke V-os átmenetéből származó γ -sugárzás (1. ábra) cirkuláris polarizációját vizsgálták meg az ismert módszerrel, amelyben a Compton-szórási hatáskeresztmetszet spin függését kihasználva mérik a γ -sugár intenzitást (transzmissziót) ellenkezően mágnesezett ferromágneses anyagokon keresztül. A használt radioaktív forrás a Hf^{181} nuklid (felezési ideje 45 nap) volt. A két irányú mágnesezettség esetén mért transzmisszióból egy olyan mennyiség képezhető, amelyik arányos P -vel, a sugárzás cirkuláris polarizációjának fokával és ebből a P kísérleti értéke meghatározható.

A Ta^{181} 482 keV-os átmenete $5/2^+ \rightarrow 7/2^+$ típusú. A paritássértés jelentkezése itt abban nyilvánulna meg, hogy az átmenetben nemcsak a szokásos M1 és E2

* *Megjegyzés a korrektúráról.* 1964 óta és e cikk megírása óta több új mérés és elméleti számítás történt a szóbanforgó effektussal kapcsolatosan [72–80]. Ezek lényegében megcáfolták Boehm és Kankleit eredményeit. Úgy látszik azonban, hogy Abov és munkatársainak mérései megállják helyüket a kritika és az újabb mérések fényében.

komponens volna kimutatható, hanem a paritássértő E1 is. Nyilvánvaló, hogy egy ilyen összetevő várhatóan (lásd előbb) igen kicsiny volta miatt, kimutatása csak akkor remélhető, ha a „normális” azaz paritás megőrző részek valami ok folytán erősen tiltottak. Éppen ez a helyzet a szóban forgó átmenetben. Itt az M1 rész egy 3×10^6 -os faktoral, a már eredetileg is kisebb valószínűségű E2 pedig egy kb. 35-szörös faktoral akadályozott, lelassított.



1. ábra. Fontosabb átmenetek a Hf^{181} bomlásában, köztük a Ta^{181} 482 keV-es γ -vonala [65] alapján

Az E1 – M1 interferencia a kijövő sugárzás cirkuláris polarizációját eredményezi, amelynek foka az elmélet szerint arányos FR -rel, ahol R a magstruktúrától (mátrix elemek) függő mennyiség, pontosabban R a paritás tiltott és a paritás megengedett („normális”) folyamat magmátrix elemeinek a viszonya, F pedig a maghullámfüggvényekben a paritássértő hozzákeveredést jellemzi (lásd előbb).* Wahlborn számításai szerint [14] az adott átmenetben a polarizáció várható értéke

$$P = -1,3 \pm 0,4(e_1/e_2) \cdot 10^{-4}$$

ahol e_1 az E1 típusú átmenetnek tulajdonítható effektív töltés és e_1/e_2 nagyságrendben egységnyi.

A kísérleti adat, amit Boehm és Kankeleit a párizsi konferencián közöltek $P = -(5 \pm 2) \cdot 10^{-4}$, ha hibája elég nagy is, elég jó egyezést mutat az elméleti értékkel. Azóta ugyanezek a szerzők újabb, nagyobb pontosságú méréseket végeztek és a kapott eredmény:

$$P = -(2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{-4} \quad (15)$$

* Szokás az F -t itt gyenge kölcsönhatási paraméternek nevezni [14].

képest [4, 8, 18]. Ennek megfelelően a béta-bomlásokban általában mind a kétféle kölcsönhatás szerepet játszik, azonban az ún. $0 \rightarrow 0$, *nem* típusú átmenetekben (pl. az O^{14} β -bomlásban) a kiválasztási szabályok tiltják az axiálvektor típusú kölcsönhatás megjelenését (tisztá Fermi átmenetek) és ez lehetőséget ad a G_V meghatározására. Ha az ($0 \rightarrow 0$, *nem*) átmenetek vizsgálatából kapott adatokat a neutron bomlására vonatkozókkal kombináljuk, meghatározhatjuk a G_A/G_V viszonyt, ami egynél határozottan nagyobb, azaz a G_A -ra nem érvényes a G_μ -vel való egyenlőség.

A μ -bomlásban csak gyengén kölcsönható részecskék szerepelnek, míg a magok béta-bomlásában, így a tiszta Fermi átmenetekben is, mindig részt vesznek erősen kölcsönható részecskék is (neutron és proton). Várható volna, hogy erős kölcsönhatásban levő részecskék részvétele a folyamatban, befolyásolja a gyenge kölcsönhatást. Ezért meglepő a G_V és G_μ egyenlősége.

Hasonló jelenség ismeretes az elektromágneses jelenségek körében, ahol a pozitron és proton elektromos töltése nagy pontossággal egyenlő. Tehát itt is az a helyzet, hogy az erős kölcsönhatás jelenléte (a proton π -mezon „ruhája”) nem befolyásolja az elektromágneses kölcsönhatást. Az elektromágneses kölcsönhatás tehát olyan univerzális kölcsönhatás, amelyet nem befolyásol más kölcsönhatás jelenléte (más szavakkal: amelyik nincs renormálva más kölcsönhatások jelenléte által). Ennek a ténynek formális kifejezése, hogy az elektromos áram megmarad, azaz

$$\frac{\partial J_e}{\partial x} = 0.$$

Visszatérve eredeti problémánkra, a kérdés tehát az, hogy a gyenge kölcsönhatások Fermi-típusa (V) esetében egy olyan univerzális kölcsönhatással állunk-e szemben, mint az elektromágneses kölcsönhatás. Ha ez igaz, akkor a J_V vektoráramra is igaz kell legyen egy (3)-hoz hasonló megmaradási tétel.

$$\frac{\partial J_V}{\partial x} = 0.$$

A V-kölcsönhatás univerzálítása képezi a CVC elmélet alapfeltevését és ebből következik ennek formális kifejezése a vektoráram megmaradása. Hogy ez az elmélet igaz-e vagy nem arról a kísérletnek kell döntenie.

Már az elmélet megfogalmazásakor [1] javasoltak egy sor kísérletet, amelylyel a CVC elmélet következményeit és ezáltal az elmélet érvényét meg lehet vizsgálni. Ezek egy kivételével — a π^+ bomlási elágazási viszonyára

$$\frac{[\pi^+ \rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu]}{[\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu']}$$

gondolunk itt — mind magspektroszkópiai mérések. A következőkben ezekről és ezek végeredményéről szeretnénk itt röviden beszámolni.

A π^+ -mezon elágazási viszonyra vonatkozólag csak annyit jegyzünk meg, hogy a legújabb kísérleti adatok [19] jó egyezést mutat a CVC elmélet alapján számítottal [6].

$$R_{CVC} = \frac{\pi^+ \rightarrow \pi^0 + e^+ + \nu}{\pi^+ \rightarrow \mu^+ + \nu_\mu} = 1,06 \cdot 10^{-8}$$

$$R_{exp} = (1,15 \pm 0,22) \cdot 10^{-8}.$$

b) Kísérletek a gyenge mágnesség kimutatására

A CVC elmélet szerint tökéletes analógia áll fenn az elektromágneses áram izovektor része és a gyenge vektoráram között. Ha felírjuk az előbbi kettőre a mátrixelemeket, az egyes tagokat megfeleltethetjük egymásnak.

Mátrixelem az elektromágneses kölcsönhatás izovektor részére:

$$M_V^{em} = e\bar{u}_2 \left[F_Q^{em}(q^2)\gamma_\mu + \frac{\mu_p^a - \mu_n^a}{2M} F_M^{em}(q^2)\sigma_{\mu\nu}q_\nu \right] u_1, \quad (4)$$

és a gyenge vektor kölcsönhatásra:

$$M_V^{gy} = (g_V/\sqrt{2})\bar{u}_2 [f_1^V(q^2)\gamma_\mu + f_2^V(q^2)\sigma_{\mu\nu}q_\nu] u_1 \quad (5)$$

Itt u_1 , u_2 a protont, ill. neutront (barionokat) leíró hullámfüggvények (spinorok), a γ_μ és $\sigma_{\mu\nu}$ a Dirac mátrixok ill. kombinációik, μ_p^a és μ_n^a a proton ill. neutron anomális mágneses momentuma, q az impulzusátadás.

A nagy F és kis f ún. alakfaktorokat megfeleltetve egymásnak látjuk egyrészt, hogy a gyenge kölcsönhatások vektor konstansát nem kell renormálni ($F_Q^{em}(0) = 1 \rightarrow f_1^V(0) = 1$), másrészt a gyenge kölcsönhatásokban is megjelenik a pionfelhő miatt egy anomális faktor megfelelően a proton és neutron mágneses momentumának,

mivel $f_2^V(q^2) \rightarrow \frac{\mu_p^a - \mu_n^a}{2M} F_M^{em}(q^2)$. Éppen ezért nevezzük (5)-ben a második tagot *gyenge mágnességnek*. Ez tehát a gyenge kölcsönhatásban a pionfelhő jelenléte miatt fellépő tag, hasonlóan ahogy az elektromágneses kölcsönhatásokban a pion felhő jelenléte behoz egy mágneses anomáliát ill. ennek megfelelő tagot.

Hogy ilyen gyenge mágnességi tag tényleg fellép-e a gyenge kölcsönhatásokban azt a kísérleteknek kell igazolniuk. Az egyik ilyen lehetőség a béta-spektrumalakban kiváltott effektus kimutatása [20], a másik a béta-alfa szögkorreláció tanulmányozása [21]. Az ezekre vonatkozó kísérleteket, ill. főleg ezek eredményeit ismertetjük itt a továbbiakban. Megemlítjük azonban, hogy a gyenge mágnességre vonatkozólag bizonyos következtetések levonhatók a müon-befogásból és nagy energiájú neutrino kísérletekből is [22].

α) Spektrumalak mérés a $B^{12} \xrightarrow{\beta^-} C^{12} \xrightarrow{\beta^+} N^{12}$ átmenetekben. A B^{12} és N^{12} alapállapota, valamint a C^{12} 15,11 MeV-os gerjesztett állapota egy $T=1$, $I=1^+$ izospintriplettet képez, melyekből β^- , β^+ ill. γ -átmenet vezet a C^{12} $T=0$, $I=0^+$ alapállapotába (3. ábra).

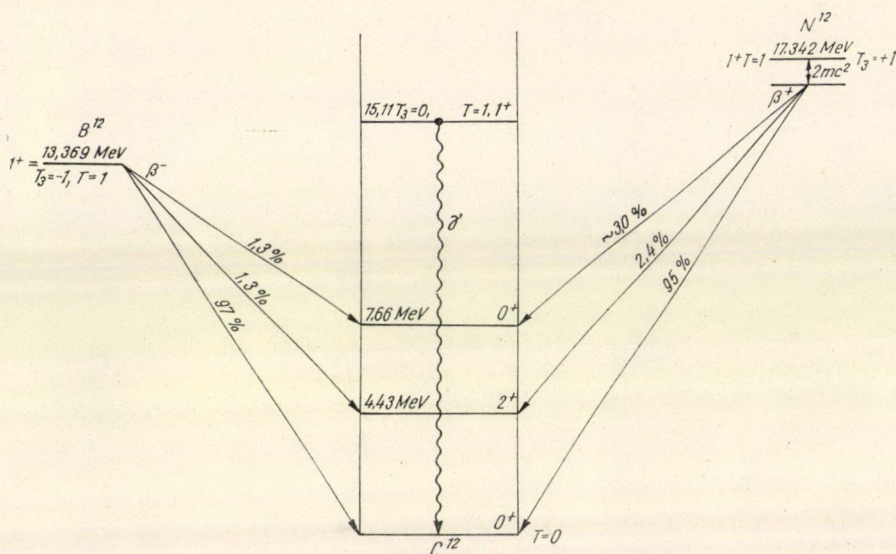
A CVC elmélet szerint az $N(E, E_0)$ kísérletileg mért spektrum eltérést fog mutatni az $F(E, E_0)$ megengedett Fermi-alaktól az energiafüggvényében

$$S(E, E_0) = \frac{N(E, E_0)}{F(E, E_0)},$$

és pedig ellenkező előjelűt a β^- és β^+ átmenet esetében. Különösen kifejezett effektus várható, ha a két eltérés hányadosát mérjük. Az elméletileg számított érték erre a hányadosra (figyelembe véve különböző korrekciókat is): $(1,10 \pm 0,17\%)$ MeV.

Kísérletileg három csoport is megmérte ezt a paramétert a következő eredménnyel:

Calif. Tech. Inst.	$(1,30 \pm 0,31) \text{ \%}/\text{MeV}$	1962	[23]
Los Alamos	$(1,62 \pm 0,28) \text{ \%}/\text{MeV}$	1963	[24]
Columbia Univ.	$(1,19 \pm 0,24) \text{ \%}/\text{MeV}$	1963	[25]



3. ábra. A $B^{12} - C^{12} - N^{12}$ triád [18]

β) $\beta - \alpha$ szögkorreláció a $Li^8 \xrightarrow{\beta^-} Be^8 \xrightarrow{\beta^+} B^8$ bomlásokat követően. Egy hasonló isomultiplettről van szó, mint az előző pontban ($T=1, I=2^+$), csak az átmenetek a Be^8 első gerjesztett állapotába ($T=0, I=2^+$) történnek itt és ez az állapot két α kisugárzásával bomlik (4. ábra).

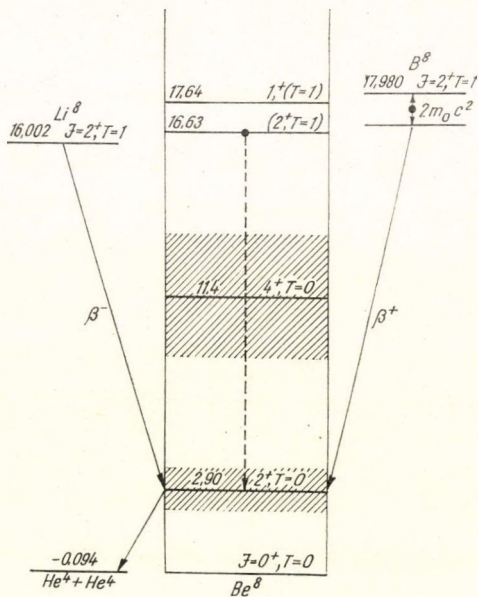
Ha gyenge mágnesség nem lép fel a természetben, akkor semmiféle szögkorreláció nincs a β -k és az α -k között. Ellenkező esetben viszont van szögkorreláció, és pedig a két bomlásban a szögkorreláció viszonyára felírható

$$\frac{W(Li^8, 9)}{W(B^8, 9)} = 1 + \delta \cos^2 \theta,$$

ahol a δ -ra, $0,005 \cdot E_\beta \text{ (MeV)} < \delta < 0,009 \cdot E_\beta \text{ (MeV)}$ határok adódnak a CVC elmélet szerint. Kísérletileg több csoport is mérte δ -t a következő eredménnyel*

* Általában a szögkorrelációt Li^8 -nál mérték. Itt a táblázatban a mért érték kétszeresét adjuk meg, ez hasonlítható össze az elméleti eredménnyel. Az itt megadott δ -k E_β -vel osztott értékek.

Freiburg Univ.	+0,0104	+0,0058 -0,0038	1960	[26]
Calif. Inst. Tech.	+0,00632	$\pm 0,0006$	1962	[27]
Köln Univ. Max—Plank Inst.	+0,0074	$\pm 0,0010$	1963	[28]
Erlangen Univ.	+0,0072	$\pm 0,0011$	1963	[29]

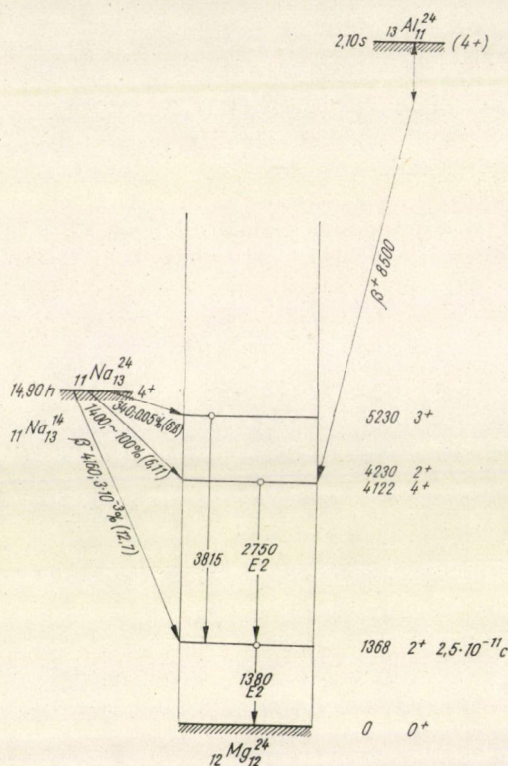
4. ábra. A Li^8 — Be^8 — B^8 triád [18].c) β — α cirkuláris polarizációs szöghorrelációs mérések

Tükör-magok közötti β -átmenet és az azt követő γ -közötti cirkuláris polarizációs szöghorrelációs mérésekből szintén lehet a CVC elmélet érvényességére következtetni [30, 31], speciálisan pl. a $\text{Na}^{24\beta^-} \rightarrow \text{Mg}^{24\beta^-} \text{Al}^{24}$ átmenetek esetében (5. ábra).

Ez az átmenet ugyanis $4^+ \rightarrow 4^+$, $\Delta T = 1$ típusú, azaz mindkét ágba a Fermi-mátrix elem zérus kell legyen a CVC elmélet szerint, feltéve, hogy az izospin jó kvantumszám. Az izospin hozzákeveredés azonban úgy hat, hogy az $M_F(\beta^-) + M_F(\beta^+) = 0$ még akkor is igaz a CVC szerint, ha az izospin megmaradás nem szigorúan érvényes.

A béta-gamma polarizációs szöghorrelációs mérésekből lehet a Fermi-mátrix elemeket ill. azok összegét meghatározni a két átmenetben. A kísérletet két csoport végezte el

Princeton Univ.	+0,0012 \pm 0,0063	1963	[23]
Lawrence Rad. Lab.	+0,0005 \pm 0,0057	1963	[33]


 5. ábra. A Na^{24} – Mg^{24} – Al^{24} triád [67]

d) Polárvektor mátrix elemek viszonya elsőrendben tiltott β -átmenetekben

Fujita [34, 35] számításai szerint az elsőrendben tiltott β -átmenetekben szereplő két polárvektor mátrix elem: $\int \alpha$ és $\int \mathbf{r}$ között a következő összefüggés áll fenn, amennyiben a CVC elmélet érvényes

$$\int \alpha = f(E_{\beta \max}, Z, R, \beta^{\pm}) i \int \mathbf{r}, \quad (6)$$

ahol f függ az átmenet energiájától, a bomló mag rendszámától, a magsugártól és attól, hogy pozitív vagy negatív β -bomlásról van szó.

Bár több ilyen kísérleti adat is van, azonban Blin-Stoyle kimutatta [36], hogy (6) összefüggés számításánál egy olyan közelítés lett használva, amelyik lehetetlenné teszi, hogy ezen az alapon a CVC elmélet érvényességét bizonyíthassuk.

e) A G_V és G_μ egyenlősége

A CVC elmélet kiindulópontja, de egyben kísérleti bizonyítéka is a kapcsolási állandó egyenlőségének kimutatása a müon bomlásban és a tiszta Fermi β -

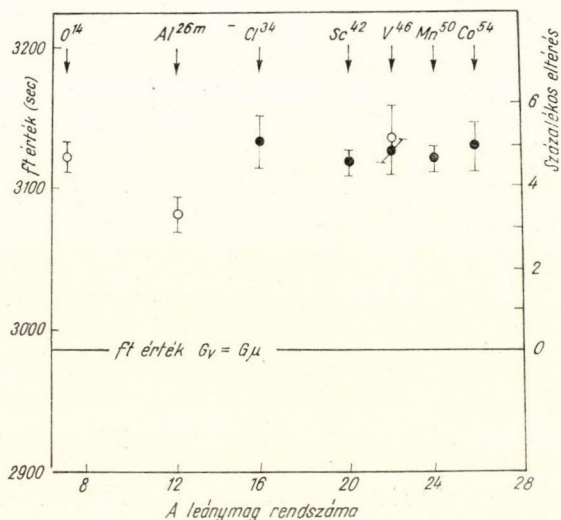
bomlásokban. A G_V meghatározásához az ft értéket kell mérni tiszta Fermi átmenetekben. Ugyanis általában

$$(ft)^{-1} = \text{konst.} [|M_V|^2 + |M_A|^2],$$

esetünkben viszont

$$|M_V|^2 = 2G_V^2 |M_A|^2 = 0.$$

Évek óta Freeman és csoportja foglalkozik pontos ft meghatározásokkal tiszta Fermi átmenetek esetére Harwellben. (p, n) küszöb mérésekből határozták meg az átmeneti energiát és nagy pontossággal megmérték a felezési időt is.



6. ábra. ft értékek tiszta Fermi átmenetekben. A fekete pontok egy laboratóriumban és egyféle módszerrel mért adatokat jelentenek [37]

A 6. ábrán amelyet legújabb közleményükből vettünk át [37], össze vannak foglalva az összes ft értékek, amelyeket Fermi átmenetekben meghatároztak. Az ábrán jól látható a határozott eltérés attól a szinttől, amely a $G_V = G_\mu$ -hoz tartozik. Ezt az eltérést próbálták korábban különféle effektusokkal magyarázni (elektromágneses effektusok, izospin hozzákeveredések, közbenső bozon létezése, lásd pl. [4]), azonban sem valamelyik önmagában, sem ezek összességükben nem vezettek kielégítő eredményre.

Az összes mért ft értékeket összevetve különben G_μ és G_V között az eltérés 2,2%. Itt említjük meg, hogy ugyancsak a legújabb adatok szerint [38] a $|G_A/G_V| = 1,18 \pm 0,025$ (ezen viszony meghatározásához a tiszta Fermi átmenetek ft értékére vonatkozó méréseket a neutron β -bomlás ft értékével kell kombinálni, mint már említettük).

Freeman és munkatársai arra a következtetésre jutnak, mint Blin-Stoyle és munkatársai [39], hogy a mért ft értékek csak akkor egyeztethetők össze a CVC elmélettel, ha Cabibbo nyomán [40] új módon fogalmazzuk meg azt. E szerint vektoráram nemcsak ritkaság kvantumszám megőrző ($\Delta S=0$) komponensekből áll, hanem ritkaság sértőkből is (pl. $\Delta S=1$) és a megmaradási törvény erre a teljes áramra igaz. Cabibbo elmélete igen jól értelmezi kvantitativ is a G_V és G_μ közötti kísérleti eltérést.

f) Következtetések, kilátások

Mint láttuk az esetek többségében elég jó egyezést mutatnak a kísérleti adatok a CVC elmélet előrejelzéseivel. Úgy tűnik azonban, hogy ez a jó egyezés legnagyobb részt csak látszólagos, mivel legtöbb esetben nem állnak elég megbízható számítások rendelkezésre arra vonatkozólag, hogy mi lenne a mért paraméterek értéke a CVC elmélet nem teljesülése esetén. Ennek az az oka, hogy vagy nem tudjuk kielégítően számításba venni a magerők hatását vagy a maghullámfüggvényeket nem ismerjük eléggé [36].

Egy további nyílt kérdés, hogy a Cabibbo-féle új megfogalmazás milyen hatással lenne a G_V , G_μ kapcsolási állandók különbségének értelmezésén kívül, a mért paraméterek elméletileg számított értékére.

Így érthető az a különben érdekes tény, hogy a CVC elmélet igazolására végzett legfrissebb mérések is, kivéve a G_V -re vonatkozókat, 1963-ból valók. Azt lehet mondani, hogy a kísérlet egyelőre itt megtette a magáét, most ismét az elméleté a szó.

g) G -paritássértés

A CVC elmélet igazolására végzett kísérleteknek van egy igen figyelemre méltó mellék eredménye: kísérleti bizonyítékot kaptunk az ún. G -paritássértésre gyenge kölcsönhatásokban. A G -paritás jelenti két operáció egymásutánját: töltés tükrözés (a folyamatban résztvevő részek ellenkező előjelűvé transzformálása) és töltés konjugáció (a részecskék antirészecskéjüké transzformálása).

A $B^{12} - C^{12}$ és az $N^{12} - C^{12}$ bomlásban izobártripletttről lévén szó, teljesen azonos ft értéket várhatnánk (legfeljebb néhány % különbség jöhetne be különböző effektusok miatt). Ezzel szemben a CVC elmélet igazolására (lásd előbb) végzett igen pontos kísérletek a két bomlás ft értékében minden esetben 10%-nál nagyobb különbséget adtak.

Legutóbb Blin-Stoyle és Rosina [41] vizsgálták meg részletesen ezeket az eltéréseket és arra a következtetésre jutottak, hogy a különbség nem magyarázható sem elektromágneses, sem más töltés függő effektusokkal. Az egyetlen lehetőségnek látszik a G -paritássértés feltételezése a β -bomlásokban.* Ez többek között pl. azzal a következménnyel jár az (5) kifejezésben, hogy egy eddig elhanyagolható tag, az indukált skalár is megjelenik.

* *Megjegyzés a korrektúránál.* Mafethe és Hodgson legújabb számításai [81] megerősítik Blin-Stoyle és Rosina eredményeit, de korainak tartják az utóbbiak végkövetkeztetéseit, mivel még további lehetőségeket látnak az elméleti és kísérleti ft értékek közelebbhozására, ha bizonyos eddig nem tekintett magstruktúra effektusokat is figyelembe vesznek a számításokban.

4. Időfordító invariencia erős kölcsönhatásokban

A gyenge kölcsönhatásokban fellépő paritássértés felfedezése óta tüzetes vizsgálatoknak vetik alá a legalapvetőbbnek látszó megmaradási törvényeket is [52]. Így legújabban többféle módon megvizsgálták az elektromos töltés megmaradását is.

Az ilyen vizsgálatok sorában szerepel az erős kölcsönhatások időfordítással (tehát amikor T helyett $-T$ -t helyettesítünk be) szembeni invarienciájának igazolása, amely igen alapvető jelentőségű. A kérdést elméletileg Henley és Jacobsohn vizsgálták meg részletesen és ők javasoltak megfelelő kísérleti lehetőségeket is a tapasztalati ellenőrzésre [53, 54].

A javasolt kísérletek között hangsúlyozottan szerepelnek magspektroszkópiai kísérletek, közelebbről szögkorrelációs vizsgálatok. Hogyan lehet ezekből a vizsgálatokból az időfordító varienciára következtetni az erős kölcsönhatásokban?

Ha van egy kevert multipolaritású γ -átmenetünk, akkor a δ keveredési koeficient általában így adhatjuk meg

$$\delta = \frac{\|M'_L\|}{\|M_L\|}$$

ahol L és L' a két különböző multipolaritás, $\|M_L\|$ és $\|M'_L\|$ pedig a megfelelő mátrix elemek. Ha azonban feltételezzük, hogy az erős kölcsönhatások nem invariánsak időfordítással szemben, akkor a keveredési koeficiens értéke nem egyszerűen δ lesz, hanem

$$|\delta|e^{i\eta} = |\delta|(\cos \eta - i \sin \eta).$$

Ha tehát igazolni akarjuk az erős kölcsönhatások időfordító invarienciáját, akkor vagy azt kell kimutatnunk, hogy $\cos \eta = 1$ vagy azt, hogy $\sin \eta = 0$, mert akkor a δ melletti faktor 1 lesz és így visszakapjuk δ régi idő invariencia sértés nélküli értéket.

Mármost a $\cos \eta$ γ - γ szögkorrelációs vizsgálatokban, a $\sin \eta$ polarizált magokból eredő γ - γ szögkorrelációs mérésekben határozható meg. A $\cos \eta$ -t azonban nem lehet olyan pontosan mérni, mint a $\sin \eta$ -t, mivel általában zérushoz viszonyítva egy kis értéket pontosabban meg lehet határozni, mint az egységtől egy kis eltérést.

Legutóbb egy bolognai csoport végzett méréseket $\sin \eta$ meghatározására $\beta - \gamma_1 - \gamma_2$ -szögkorrelációs vizsgálatokban [55, 56]. Itt kihasználták azt a tényt, hogy β -bomlás után a mag polarizáltan marad vissza és így a hármas koincideneciával ugyanaz valósul meg mintha orientált magokból eredő γ -k szögkorrelációját vizsgálnák.

A konkrét mérési elrendezés szerint a forrás felett volt a β -detektor és a β -detektor és a forrást összekötő egyenesre merőleges síkban foglalt helyet a két γ -detektor. Ezek közül az egyik mozgatható volt, a másik állt. A mérés folyamán két a 180° -hoz képest szimmetrikus helyzetben mérték az R ill. L koincidenencia impulzusszámot (lásd a 7. ábrát). Az

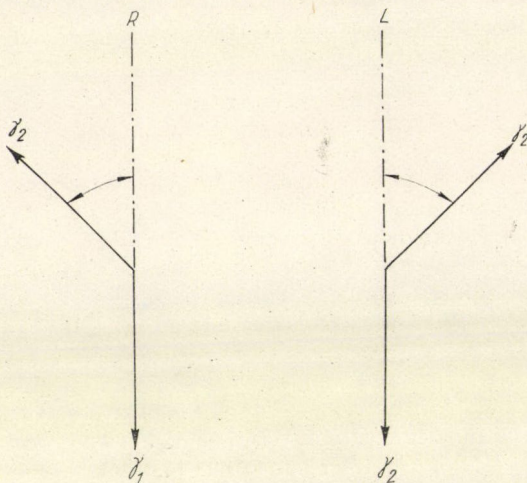
$$\varepsilon = \frac{R - L}{R + L}$$

menyiség arányos a $\sin \varphi$ -vel, ahol az arányossági tényező a konkrét mérési feltételekből megadható.

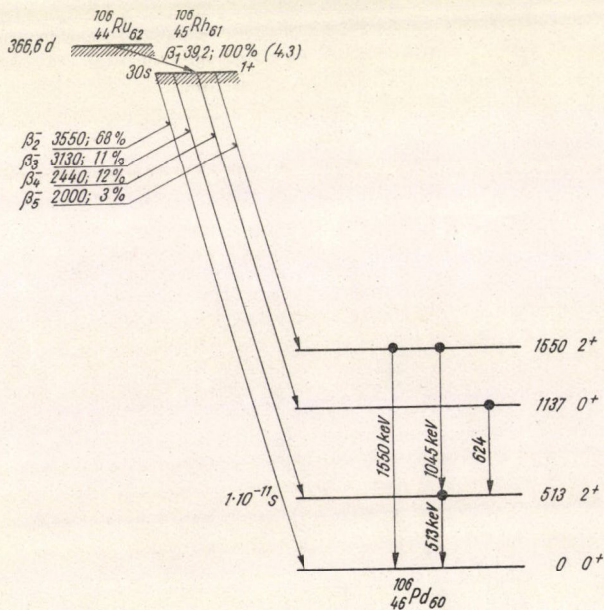
Fuschini és csoportja a méréseket két különböző radioaktív izotóp esetében is elvégezte, a Ca^{47} és a Rh^{106} (8. ábra) bomlásában. Ezek közül különösen az utóbbi

igen figyelemre méltó, mivel itt különösen nagy pontossággal sikerült a méréseket elvégezni. Ebből a mérésből

$$\sin \varphi = (3 \pm 4) \cdot 10^{-2}$$



7. ábra. A γ -számlálók helyzete a $\beta - \gamma - \gamma$ szögkorrelációs méréseknél, amelyben az erős kölcsönhatások időfordító invarienciáját vizsgálták.



8. ábra. A ${}^{106}\text{Rh}$ bomlási sémájának főbb vonásai ([56] után)

és így az F időfordító invariencia paraméterre megadható határ

$$F < 4\%$$

Érdemes itt megjegyezni, hogy ez a megállapított legalacsonyabb határ ennek a paraméternek az értékére. Magreakciós mérésekből 8%-os, szórási és polarizációs mérésekből pedig 7%-os határt kaptak.*

5. A Fierz-féle interferencia term

Mint ismeretes a β -bomlás formuláiban fellépnek olyan tagok, amelyben az S , V , illetőleg az A , T kölcsönhatási állandók vegyes szorzatai szerepelnek. Ezeket a ki-fejezéseket nevezzük Fierz-termnek.

A két komponensű neutrino elmélet, a jelenleg elfogadott β -bomlási elmélet szerint a bomlási folyamatért a $V-A$ kölcsönhatási kombináció felelős (lásd pl. [42]-ben), és ebből következik, hogy az összes $C_S C_V$, $C_T C_A$ típusú szorzatok zérussal egyenlők, tehát maga a Fierz-term is.

Milyen kísérleti bizonyítékaink vannak azonban ezen ún. interferencia-tag zérus voltáról? „Klasszikusnak” számító módszer a β -spektrumalak vizsgálat, további módszerek a tiszta Fermi átmenetek ft értékének analízise, elektron polarizációs mérések és végül az ε/β^+ viszony meghatározása [43, 44].

A Fierz-féle tag jelenlétét egyik módszerrel sem lehetett kimutatni, azonban a leg-utóbbi módszerrel megadható felső határ kb. egy nagyságrenddel kisebb, mint az előző három módszer esetében. Így a polarizációs, spektrumalak és ft érték mérések szerint a b -vel jelölt Fierz-term

$$b < 0,1$$

míg a megfelelő határ az ε/β^+ mérésekből egy nagyságrenddel kisebb [46].

Annál figyelemreméltóbb, hogy egy legújabb ilyen típusú mérés [45] véges nagyságú Fierz-term értékhez vezetett. Nézzük ezért kissé részletesebben, hogy hogy kap-
hatjuk meg b -t az ε/β^+ mérésekből.

Ez utóbbi esetben a Fierz-term becslése a következőképpen történik. Ismeretesek az irodalomban a megengedett átmenetek esetére számítások az (ε_K/β^+) elágazási viszonyra [47], amelyeket a Fierz-tag zérus voltának feltételezésével végeztek. Ha most $(\varepsilon_K/\beta^+)_e$ az elméleti érték és $(\varepsilon_K/\beta^+)_k$ a mért érték, akkor [43]

$$b = \frac{1}{2} \frac{(\varepsilon_K/\beta^+)_k - (\varepsilon_K/\beta^+)_e}{(\varepsilon_K/\beta^+)_e + (\sigma_K/\beta^+)_k W^{-1}}$$

ahol $\overline{W^{-1}}$ jelenti $1/W$ átlagértéket a folytonos β -spektrum felett.

Williams az ismeretesen igen egyszerű bomlási sémájú Na^{22} (9. ábra) esetében igen nagy pontossággal 4π proporcionális kamrát és NaJ(Tl) kristályt használva $\beta-\gamma$ koincidencia módszerrel mérte meg az ε_K/β^+ kísérleti értéket. A következőt kapta

$$(\varepsilon_K/\beta^+)_k = 0,1041 \pm 0,001,$$

* Legújában egy prágai kutató csoport [69] polarizált neutron befogással orientált magokból eredő kaszkád γ -átmenetek vizsgálatával a határt még lejjebb szorította: $F < 2\%$.

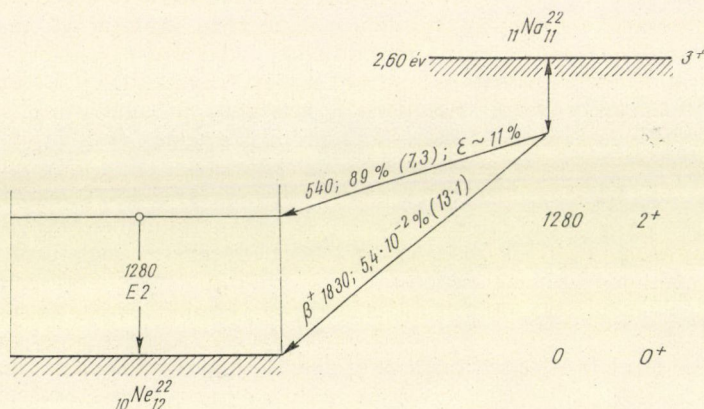
míg az elméleti érték

$$(\epsilon_K/\beta^+)_e = 0,1135 \pm 0,002.$$

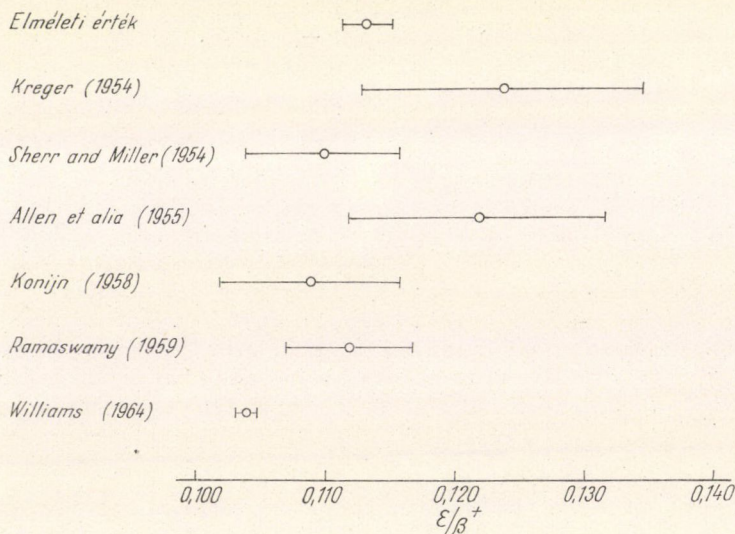
A kísérleti értéket és hibáját összehasonlítva a korábbi mérések eredményével a 10. ábra mutatja.

A két érték tehát határozottan hiba határon kívül különbözik egymástól és az ezek alapján számított b érték pedig zérustól,

$$b = -(2,5 \pm 0,6) \cdot \%$$



9. ábra. A Na^{22} bomlási sémája ([65] alapján)



10. ábra. A Na^{22} bomlásában mért ϵ/β^+ értékek és pontosságuk [45]

A szerző azonban maga sem meri azt állítani, hogy a Fierz-féle interferencia tag tényleg zérustól különböző, ez annyira ellentétben van az egész jelenlegi elmélettel. Az elméleti és kísérleti érték eltérését azzal próbálja magyarázni, hogy a Na^{22} szóban forgó átmenete, amelyekre az elágazási viszony méréseket végezte, ún. I -tiltott átmenet és ezekre talán a ε_K/β^+ elméleti értéke alacsonyabb lenne, mint a megengedett átmenetre.

Az irodalom már korábban elvégzett analízise és saját méréseink alapján [48, 49] azonban azt kell mondanunk, hogy Williams itt kifejtett magyarázata valószínűleg nem állja meg a helyét.*

Arról van ugyanis szó, hogy ez ε_K/β elágazási viszony kérdését I -tiltott átmenetekben intézetünkben vetettük fel először és részben ilyen irányú méréseket végeztünk a Co^{56} esetében, részben analizáltuk az irodalomban levő elég kis számú, más I -tiltott átmenetekre vonatkozó adatokat [48]. Következtetésünk az volt, hogy az I -tiltott átmenetekben nem lehetett eddig kétségtelenül kimutatni eltérést a megengedett értékből. A kérdés azonban nem problémamentes és további pontosabb mérésekre lenne szükség.

Ez tehát még megengedhetné a Williams-féle magyarázatot. Azonban általában a tiltott átmenetekben az ε_K/β^+ adatok analízise [48] azt mutatja, hogy az elmélet és kísérlet között észlelt eltérések (pl. az elsőrendben nem egyértelműen tiltott átmenetekben [50, 51] minden esetben olyan irányúak voltak, hogy a mért érték nagyobb volt, mint az elméleti, azaz a tiltottság az elágazási viszonyt növelte és nem csökkentette.

Ez az ami legalábbis kétséggé teszi Williams magyarázatát és így magyarázatra vár az igen pontos mérés alapján számított véges Fierz-paraméter érték.

6. Pszeudoskalár kölcsönhatás a béta-bomlásban

Mint már többször említettük, ma már kétségtelen kísérleti ténynek tekinthető, hogy a β -bomlást létrehozó kölcsönhatás $V-A$ típusú, sőt a két kölcsönhatási típus viszonya is elég nagy pontossággal ki van mérve (lásd előbb). A P kölcsönhatás szerepe azonban ma sem teljesen tisztázott.

Maga a pszeudoskalár operátor páratlan paritású, azaz csak olyan bomlásban vehet részt ez a kölcsönhatás, ahol a kiinduló és a végállapot paritása különböző. Ez annyit jelent egyúttal, hogy megengedett átmenetekben nem lehet szerepe a pszeudoskalár variánsnak.

A legalkalmasabbnak látszik a paritás változással járó, azaz elsőrendben tiltott, $0 \rightarrow 0$ átmenetek vizsgálata, mivel itt a V kölcsönhatás nem szerepelhet és mérhetjük P viszonyát az A -hoz [57]. Ilyen átmenet több is ismeretes, azonban kísérletileg és elméletileg is a $\text{Pr}^{144} \rightarrow \text{Nd}^{144}$ volt a legrészletesebben tanulmányozva [57–59].

Legújabbán Daniel és munkatársai [60] mérték a Pr^{144} (bomlási sémát lásd a 11. ábrán) β -spektrum alakfaktorát és a β -részecske longitudinális polarizációját. Ezen két adatból határt tudtak megadni a $|C_P/C_V|$ viszonyra és λ -ra az $i\int \gamma_5$ és $\int \sigma\tau$ mátrix elemek viszonyára.

A kapott $|C_P/C_A| < 5$ érték alacsonyabb határ mint a korábbi $|C_P/C_A| < 90$ [57], de még mindig igen nagy különösen az elméleti várákozáshoz viszonyítva [61].

* A legújabb irodalmi adatok szerint még ez a kép is összezavarodott úgy, hogy az ε/β^+ elágazási viszony kérdése tisztázásra vár a tiltott átmenetekben [70].

Megjegyezzük, hogy az effektív pszeudoskalár kölcsönhatás az előbbi értékek osztva az elektron-nukleon tömegviszonnyal, mivel a C_p -t tartalmazó tag előtt m_e/m_p faktor szerepel.

A valóban legfrissebb, nyomtatásban még meg sem jelent eredmény, erre a problémára vonatkozólag az, amiről az elmúlt decemberben levélben kaptam tájékoztatást [62]*.

Minden eddigi analízisben ($0 \rightarrow 0$, igen) átmenetben mért negatív β -spektrum alakfaktort és negatív β -részecske (elektron) longitudinális polarizációs koefficienszt használtak fel a pszeudoskalár kölcsönhatás jelenlétének kimutatására. Alaga és munkatársai más oldalról közelítették meg a kérdést. Az Eu^{152*} (0^-) izomér állapotából a Sm^{152} (0^+) alapállapotába vezető átmenetre (lásd 12. ábra) két mérhető mennyiséget, az ϵ_K/β^+ elágazási viszonyt és az ϵ_K/ϵ_L viszonyt vették tekintetbe. E két mennyiséget kiszámolták és két külön táblázatban megadták a mátrix elemek viszonya és a pszeudoskalár-axiálvektor kölcsönhatási viszony, mint paraméterek függvényében.

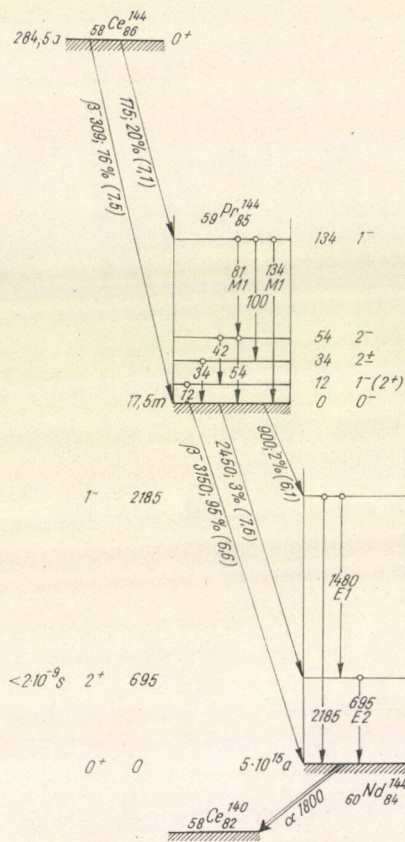
Megfontoltuk a megfelelő kísérleti vizsgálat kivitelezhetőségének feltételeit. Sajnos a kielégítő pontosságú mérés elvégzésére ezidő szerint nem sok remény van, pedig az nagyon érdekes lenne éppen az alapvető kölcsönhatások szempontjából.

7. Következtetések

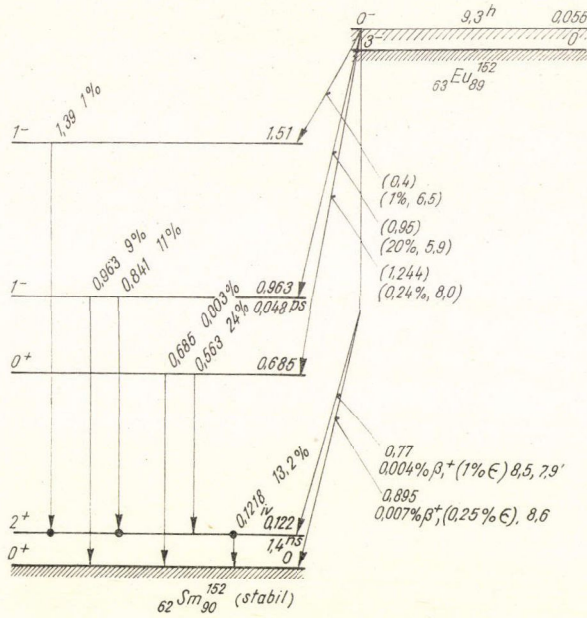
A magspektroszkópia szerepéről és lehetőségeiről az alapvető kölcsönhatások szempontjából itt megrajzolt kép természetesen nem léphet fel a teljesség igényével. Lehetett volna pl. beszélni a magerők töltésfüggetlenségéről, amelyekre vonatkozólag Blin-Stoyle véleménye szerint éppen a béta-mátrix elemek vizsgálata szolgáltatja a legigéretebb lehetőséget, vagy pl. a kettős β -bomlásról, amelyre vonatkozó legújabb kísérletek most fejeződtek be Brookhavenben, de az eredmények még nem kerültek közlésre [64].

Az ebben az előadásban tárgyalt eredményeket részben jelentőségük, de talán még inkább újdonságuk alapján választottam ki.

* A kézirat beküldése óta pedig [71]-ből.



11. ábra. A Pr^{144} bomlási sémájának főbb átmenetei ([67] után)



12. ábra. Fontosabb átmenetek az $\text{Eu}^{152*} \rightarrow \text{Sn}^{152}$ bomlásában ([66] után)

Befejezésképpen még egy megjegyzést szeretnék fűzni hozzájuk. Nem érdektelen dolog, hogy az itt tárgyalt kísérletek döntő többsége olyan, ami a hazai, sőt az intézeti magspektroszkópia és alacsony energiájú magfizika lehetőségein belül van. Ez pedig tárgyi érdekességükön és jelentőségükön túl számunkra határozottan praktikus mondanivalót is jelent.

IRODALOM

1. R. P. Feynman, M. Gell—Mann, Phys. Rev., 109 (1958) 193.
2. M. Gell—Mann, Revs. Mod. Phys., 31 (1961) 834.
3. J. C. Taylor, Reports on Progress in Phys., 27 (1964) 407.
4. R. J. Blin—Stoyle, Selected Topics in Nuclear Spectroscopy (edited by B. J. Verhaar) North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1964. p. 199.
5. Nagy Károly, Fizikai Szemle, 15 (1965) 100.
6. P. T. Matthews, 285A (1965) 214.
7. Comptes Rendus du Congrès International de Physique Nucléaire, Vol. I. Éd. du Centre National de la Recherche Sci., Paris. 1964. p. 437.
8. D. H. Wilkinson, Proc. Phys. Soc. 80 (1962) 997.
9. L. Krüger, Zeits. f. Phys., 157 (1959) 369.
10. F. C. Michel, Phys. Rev., 133B (1964) 329.
11. F. Boehm and E. Kankeleit, Comptes Rendus du Congrès International de Physique Nucléaire, Vol. II. Éd. du Centre National de la Recherche Sci., Paris, 1964. p. 1181.
12. Yu. G. Abov, P. A. Krupchitsky, Yu. A. Oratowsky, Comptes Rendus du Congrès International de Physique Nucléaire Vol. II. Éd. du Centre National de la Recherche Sci., Paris, 1964. p. 1207.

13. Yu. G. Abov, P. A. Krupchitsky, Yu. A. Oratovsky, *Physics Letters*, 12 (1964) 25.
14. S. Wahlborn, *Phys. Rev.*, 138B (1965) 530.
15. F. Boehm and E. Kankleit, *Physics Letters*, 14 (1965) 312.
16. R. J. Blin—Stoyle, *Phys. Rev.*, 120 (1960) 181.
17. C. C. Гепумейн, Я. Б. Зельдович, *ЖЭТФ*, 29 (1955) 698.
18. C. S. Wu, *Revs. Mod. Phys.*, 36 (1964) 618.
19. P. Depommier, J. Heintze, C. Rubbia, V. Soergel, *Physics Letters*, 5 (1963) 61.
20. M. Gell—Mann, *Phys. Rev.*, 111 (1958) 362.
21. J. Bernstein, R. R. Lewis, *Phys. Rev.*, 112 (1958) 232.
22. V. L. Telegdi, *Lecture Notes From the Second Berger International School of Physics*. Benjamin, Inc. New York, 1963, p. 26.
23. T. Mayer—Kuckuk, F. C. Michel, *Phys. Rev.*, 127 (1962) 545.
24. N. W. Glass, R. W. Peterson, *Phys. Rev.*, 130 (1963) 299.
25. Y. K. Lee, L. W. Mo, C. S. Wu, *Phys. Rev. Lett.*, 10 (1963) 253.
26. K. Krebs, H. Rieseberg, V. Soergel, *Zeits. f. Phys.*, 159 (1960) 232.
27. M. E. Nordberg, Jr., F. B. Morinigo, C. A. Barnes, *Phys. Rev.*, 125 (1962) 321.
28. W. Gruhle, K. H. Lauterjung, B. Schimmer, U. Schmidt—Rohr, *Nuclear Phys.*, 42 (1963) 321.
29. G. Ischenko, D. Seyboth, H. Wegener, *Zeits. f. Phys.*, 175 (1963) 422.
30. C. C. Bouchiat, *Phys. Rev. Letters*, 3 (1959) 516.
31. C. C. Bouchiat, *Phys. Rev.*, 118 (1960) 540.
32. E. L. Haase, H. A. Hill, D. B. Knudsen, *Bull. Am. Soc. Phys.*, 8 (1963) 74.
33. K. G. Mann, S. D. Bloom, A. Scott, R. Policher, J. R. Richardson, *Lecture in the Conference on Low and Medium Energy Nuclear*, Manchester, 1963.
34. J. J. Fujita, *Phys. Rev.*, 126 (1962) 202.
35. J. J. Fujita, *Prog. in Theor. Phys.*, 28 (1962) 338.
36. R. J. Blin—Stoyle, *Nuclear Physics*, 57 (1964) 232.
37. J. M. Freeman, G. Murray, W. E. Burcham, *Phys. Letters*, 17 (1965) 317.
38. C. P. Bhalla, *Phys. Letters*, 19 (1966) 691.
39. R. J. Blin—Stoyle, S. C. K. Nair, S. Papageorgiou, *Preprint. Physics Laboratory, University of Sussex, Brighton, Sussex, England*.
40. N. Cabibbo, *Phys. Rev. Letters*, 10 (1963) 531.
41. R. J. Blin—Stoyle, M. Rosina, *Nuclear Phys.*, 70 (1965) 321.
42. E. J. Konopinski and M. E. Rose, in the book „ α -, β - and γ -Ray Spectroscopy” (ed. by K. Siegbahn). North—Holland Publ. Co., Amsterdam, 1965. p. 1327.
43. J. Konijn, *Thesis. Delft*, 1958.
44. C. S. Wu, in the book „ α -, β - and γ -Ray Spectroscopy” (ed. by K. Siegbahn). North—Holland Publ. Co., Amsterdam, 1965. pp. 1370—1371.
45. A. Williams, *Nuclear Physics*, 52 (1964) 324.
46. R. Sherr, R. H. Miller, *Phys. Rev.*, 93 (1954) 1076.
47. P. F. Zweifel, *Phys. Rev.*, 96 (1954) 1572 and 107 (1957) 329.
48. D. Berényi, *Nuclear Phys.*, 48 (1963) 121.
49. D. Berényi, L. Kazai, *Nucl. Phys.*, 61 (1965) 657.
50. D. S. Harmer, M. L. Perlman, *Phys. Rev.*, 122 (1961) 218.
51. J. Konijn, B. van Nooijen, A. H. Wapstra, *Nucl. Phys.*, 16 (1960) 683.
52. C. S. Wu, in the book „ α -, β - and γ -Ray Spectroscopy” (ed. by K. Siegbahn) North—Holland, Publ. Co., Amsterdam, 1965. p. 1313.
53. E. M. Henley, B. A. Jacobsohn, *Phys. Rev.*, 113 (1959) 225.
54. B. A. Jacobsohn, *Phys. Rev.*, 113 (1959) 234.
55. E. Fuschini, V. Gadjokov, C. Maroni, P. Veronesi, *Nuovo Cim.*, 33 (1964) 709.
56. E. Fuschini, V. Gadjokov, C. Maroni, P. Veronesi, *Nuovo Cim.*, 33 (1964) 1309.
57. C. P. Bhalla, M. E. Rose, *Phys. Rev.*, 120 (1960) 1415.
58. D. Tadic, *Nuclear Phys.*, 18 (1960) 138.
59. D. Tadic, *Nucl. Phys.*, 26 (1961) 338.
60. H. Daniel, C. Engler, G. Th. Kaschl, S. A. A. Zaidi, *Phys. Letters*, 12 (1964) 337.
61. M. L. Goldberger, S. B. Treiman, *Phys. Rev.*, 111 (1958) 354.
62. G. Alaga, Krumpotic, D. Tadic, private commutation. *Rudjer Boskovic, Inst. Zagreb*. Dec. 1965.
63. R. J. Blin—Stoyle, *Lecture's Notes. Summer Course in Nuclear Spectroscopy*, 1963
64. Matheosian, Brookhaven, National Laboratory, private commutation, 1966. jan.

65. D. Strominger, J. M. Hollander, G. T. Seaborg, *Revs. Mod. Phys.*, 30 (1958) 585.
66. Landolt—Börnstein, Gruppe I. Bd. 1. Springer Vlg. Berlin. G. H. 1961.
67. Б. С. Джелепов, Л. К. Пекер, Схемы распада радиоактивных Ядер. Изд. АН. СССР, Москва-Л., 1958.
68. В. М. Лобанов, В. А. Назаренко, Л. Ф. Саенко, Л. М. Смотрицкий. Программа и тезисы докладов XVI ежегодного совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Издательство „Наука”, Москва—Ленинград, 1966. стр. 138.
69. J. Kaffos, J. Kopeckij, J. Honzátka, *Physics Letters*, 20 (1966) 284.
70. D. Berényi, *Közlés előkészületben*.
71. F. Krumpotic, D. Tadic, Preprint, Inst. „R. Boskovic”, Zagreb, 1966.
72. P. Bock and H. Schopper, *Physics Letters*, 16 (1965) 284.
73. H. Paul, M. McKeown and G. Scharff-Goldhaber. Előadás az 1966. évi moszkvai Mag-spektroszkópiai Konferencián.
74. P. Bock, B. Jenschke and G. Schopper, *Physics Letters*. 22 (1966) 316.
75. R. A. Carhart, *Bull. Am. Phys. Soc.*, 11 (1966) 353.
76. В. М. Лобашов, В. А. Назаренко, Л. Ф. Саенко и Л. М. Смотрицкий, Тезисы докладов XVI. ежег. сов. по яд. сн. и структуре а. я., Москва, 1966 г.
77. R. D. Lawson and R. E. Segel, *Phys. Rev. Letters*, 16 (1966) 1006.
78. H. Blumberg, K. -H. Speidel, H. Schlenz, R. L. Rasera and E. Bodenstedt, *Phys. Letters*, 22 (1966) 328.
79. R. Hager and E. Seltzer, *Physics Letters*, 20 (1966) 180.
80. E. Magueda and R. J. Blin-Stoyle, *Nuclear Physics*, A91 (1967) 460.
81. M. E. Mafethe and P. E. Hodgson, *Proc. Phys. Soc.* 87 (1966) 429.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMPOSZTULÁTUM ÉS AZ ATOMISZTIKA ÚJABB FEJLŐDÉSE*

N. BÖHR

Az utóbbi években kifejlődött kvantumelméleti módszerek fizikai értelmezéséről folytatott vitával kapcsolatban szeretném előterjeszteni a következő általános megjegyzéseket az atomi jelenségek leírása alapját képező elvekre vonatkozóan, melyek talán hozzájárulhatnak az ezen a területen uralkodó, egymástól oly nagy mértékben eltérő nézetek kibékítéséhez.

1. § Kvantumposztulátum és kauzalitás

Jellemző a kvantumelméletre az a felismerés, hogy a klasszikus fizika fogalmai, ha azokat atomi jelenségekre alkalmazzuk, alapvető korlátozásoknak vannak alávetve. Az ebből adódó tényállás különleges természetű, minthogy tapasztalásunk anyagának értelmezése lényeges módon a klasszikus fogalmak alkalmazásán alapszik. A nehézségek ellenére, melyek ennek folytán a kvantumelmélet tartalmának megfogalmazását gátolják, úgy látszik — mint látni fogjuk —, hogy az elmélet értelme kifejezésre juttatható az ún. kvantumposztulátumon keresztül, mely szerint minden atomi folyamat tartalmazza a diszkontinuitás vagy inkább individualitás bizonyos vonását, mely a klasszikus fizika elméleteitől teljesen idegen és amelyet a Planck-féle hatáskvantum jellemez.

E posztulátum következményeként az atomi jelenségek kauzális tér-időbeli leírásáról bizonyos mértékben le kell mondani. Ténylegesen a természeti jelenségek szokásos leírása végső fokon ama feltevésen alapszik, amely szerint a szóban forgó jelenségeket meg lehet figyelni anélkül, hogy azokat ezáltal lényegesen befolyásolnánk. Ez világosan kifejezésre jut a relativitáselmélet megfogalmazásában is, amely a klasszikus fizika elméleteinek tisztázásában oly gyümölcsöző volt. Amint *Einstein* kiemelte, minden megfigyelés vagy mérés végső soron két független esemény ugyanazon tér-idő-pontban való koincidenciáján alapszik. Éppen ezt a koincidenciát nem érinti a különbség, amely egyébként a különféle megfigyelők tér-idő-leírása között esetleg megmutatkozik. A kvantumposztulátum mármost azt jelenti, hogy

* Ez a dolgozat lényegében egy a kvantumelmélet jelenlegi állásáról a Volta-ünnepség alkalmából 1927. szeptember 16-án Comoban megtartott előadás tartalmát adja vissza. Ami az elméletnek közvetlenül az új módszerek kidolgozása előtti állását illeti, ezzel kapcsolatban legyen szabad a szerző „Atomtheorie und Mechanik” c. összefoglaló előadására utalni (*Naturwissenschaften* 14, 1, 1926). Az időközben bekövetkezett rendkívüli fejlődés igen kiterjedt irodalom létrejöttét eredményezte. Itt meg kellett elégednünk néhány utalással azon újabb munkákra, amelyek a következő megfontolásokat illetően különleges súllyal esnek latba. — A dolgozat eredetileg megjelent: *Naturwissenschaften* 16, 245, 1928.

az atomi jelenségek minden fajta megfigyelése szükségszerűen a mérőeszközzel való, el nem hanyagolható kölcsönhatást von maga után, és hogy ily módon sem a jelenségeknek, sem pedig a mérőeszközöknek nem tulajdonítható a szokott értelemben vett önálló fizikai realitás. Egyáltalán a megfigyelés fogalma önkényt rejt magában, minthogy abban lényeges szerepet játszik, hogy mely objektumokat számítjuk hozzá a megfigyelni kívánt rendszerhez. Végső soron minden megfigyelés önként értedődően érzéki észleleteinkre vezethető vissza. Az a körülmény azonban, hogy a megfigyelések értelmezése során mindenkor elméleti elgondolásokra kell támaszkodnunk, maga után vonja, hogy minden egyes esetben a célszerűség kérdése: mely ponton vezetjük be a megfigyelés fogalmát és a leírásnak a kvantumposztulátummal kapcsolatos „irracionális” vonását.

Ez a tényállás messzemenő következményeket von maga után. Egyrésztől valamely fizikai rendszer állapotának definíciója — szokásos felfogás szerint — minden külső befolyás kizárását kívánja; ekkor azonban a kvantumposztulátum szerint a megfigyelés bármifajta lehetősége is ki van zárva, s mindennek előtt a tér és idő fogalma elveszíti közvetlen jelentését. Ha másrésztől annak érdekében, hogy megfigyelésre lehetőség nyíljk, megengedjük esetleges kölcsönhatások felléptét alkalmas, a rendszerhez nem tartozó külső mérőeszközökkel, úgy a dolog természete szerint a rendszer állapotának egyértelmű definíciója többé nem lehetséges, és kauzalitásról a szokott értelemben nem beszélhetünk. A kvantumelmélet lényegének megfelelően be kell tehát értnünk azzal, hogy a tér-időbeli leírást és a kauzalitás követelményét — melyek egyesítése a klasszikus fizika elméleteire jellemző — mint tapasztalatunk tartalma leírásának komplementer, de egymást kizáró vonásait fogjuk fel, amelyek a megfigyelések, ill. definíciók lehetőségeinek idealizációját jelképezik. Ugyanúgy, amint a relativitáselméletnek megfelelően tudomásul vesszük, hogy a tér és az idő éles, érzékeinktől megkívánt szétválasztásának célszerűsége csupán azon alapszik, hogy a szokásosan előforduló relatív sebességek a fény sebességéhez képest kicsik, azonképpen a kvantumelmélet felfedezése jelentheti annak felismerését, miszerint az egész kauzális téridőbeli szemléleti mód alkalmas volta csupán annak folyománya, hogy a hatáskvantum a szokásos érzéki észleletek esetében tekintetbe jövő hatásokhoz képest kicsi. Az atomi jelenségek leírása esetében a kvantumposztulátum ténylegesen azon feladat elé állít bennünket, hogy egy „komplementaritáselméletet” építsünk ki, melynek ellentmondástól mentes volta csak a definíciók és megfigyelések lehetőségeinek mérlegelése alapján ítélnhető meg.

Ez a felfogás már a fény és az anyagi építőkövek természetének sokat vitatott kérdése esetében érvényre jut. Ami a fényt illeti, annak téridőbeli tovaterjedését — mint ismeretes — racionális módon leírja az elektromágneses fényelmélet. Speciálisan mind az üres térben fellépő interferenciajelenségekre, mind pedig az anyagi közegek optikai tulajdonságaira hiánytalanul kiterjed a hullámelmélet szuperpozíció-elvének érvényessége. Ugyanakkor viszont az energia- és impulzusmegmaradás a sugárzás és az anyag kölcsönhatása esetében — amint az pl. a fotoelektromos effektus és a Compton-effektus esetében megnyilatkozik — az éppen *Einstein* által kidolgozott fénykvantum-felfogáson keresztül nyer racionális kifejezést. Az egyrésztől a szuperpozíció-elv szigorú alkalmazhatóságát, másrésztől a megmaradási tételek általános érvényességét illető kételyeket, melyekre ez a látszólagos ellentmondás szolgáltatott alkalmat, — mint ismeretes — közvetlen kísérletekkel döntő módon megcáfolták. A dolgok ezen állása alkalmasint nyilvánvalóvá teszi, hogy a fényjelenségek kauzális tér-időbeli leírása nem vihető keresztül. Amennyiben a fény-

hatások tér-időbeli tovaterjedésének törvényeit kívánjuk nyomon követni, a kvantumposztulátum folyományaképpen statisztikus megfontolásokra vagyunk utalva. A kauzalitás követelményének fenntartása ezzel szemben az egyes, a hatáskvantum által jellemzett fényfolyamatok esetében a tér-időbeli viszonyokat illetően jelent lemondást. Természetesen a tér-időbeli leírás és a kauzalitás-fogalom egymástól teljesen független alkalmazásáról sohasem lehet szó. A fény természetének e két felfogása inkább két különböző próbálkozást jelent a kísérleti tényeknek megszokott szemléletmódunkkal való összeegyeztetésére, melyeken keresztül kifejezésre jut a klasszikus fogalmak komplementer jellegű korlátozottsága.

Hasonló végkövetkeztetésekre jutunk, ha az anyagi részecskék tulajdonságait vesszük szemügyre. Az elektromos töltéssel bíró elemi részecskék individualitása alkalmasint már a legáltalánosabb tapasztalatokból kiviláglik. Ugyanakkor viszont annak érdekében, hogy bizonyos tényekre, nevezetesen az elektronok fémkristályokon fellépő, nemrég felfedezett szelektív reflexiójára magyarázatot adhassunk, kénytelenek vagyunk a hullámelmélet szuperpozíció-elvére hivatkozni, *L. de Broglie* eredeti eszméinek megfelelően. Hasonlóan tehát a fény esetéhez, amíg a klasszikus fogalmakhoz ragaszkodunk, az anyag mibenlétének kérdése esetében is elkerülhetetlen dilemmával állunk szemben, melyet nyilván ugyancsak mint a tapasztalati anyag analízisének racionális kifejezését kell felfognunk. Ténylegesen itt a jelenségeknek nem egymással ellentmondásban álló, hanem egymást kiegészítő — komplementer — felfogásairól van szó, melyek csupán együtt nyújtják a klasszikus leírásmód természetszerű általánosítását. E kérdések megtárgyalása során nem szabad figyelmen kívül hagynunk, hogy az itt képviselt felfogás szerint mind az üres térben tovaterjedő sugárzás, mind pedig az izolált anyagi részecskék esetében absztrakciókkal van dolgunk, minthogy azok tulajdonságai a kvantumposztulátum folyományaiképpen csak más rendszerekkel való kölcsönhatás révén definiálhatók és észlelhetők. Ugyanakkor azonban ezek az absztrakciók — mint látni fogjuk — nélkülözhetetlen eszközül szolgálnak ahhoz, hogy a tapasztalatok tartalmának megszokott szemléletünkhöz kapcsolódó kifejezést adjunk.

A nehézségek, melyek a kvantumelméletben a kauzális tér-időbeli leírás útjában állnak és amelyek régóta vita tárgyát képezik, az utóbbi időben az új szimbolikus módszerek kifejlődésével az érdeklődés előterébe kerültek. Fontos hozzájárulást nyújtott újabban e módszerek ellentmondásmentes alkalmazásának kérdéséhez *Heisenberg* [1]. Ebben az összefüggésben különösen azt a sajátos reciprok bizonytalanságot hangsúlyozta, amely az atomi mennyiségek mindenfajta méréséhez hozzátapad. Mielőtt azonban *Heisenberg* megfontolásával részletesebben foglalkoznánk, célszerű lesz megmutatni, mennyire elkerülhetetlennek látszik a leírás ezen bizonytalanságban jelentkező komplementer vonása már azon legegyszerűbb fogalmak elemzése esetében is, amelyek a tapasztalatok értelmezése alapszik.

2.§ Hatáskvantum és kinematika

A hatáskvantum és a klasszikus fogalmak között fennálló alapvető ellentét kiviláglik azon egyszerű képletekből, amelyek közös alapját képezik a fénykvantumok elméletének és az anyagi részecskék hullámelméletének. Jelöljük a Planck-állandót h -val; ekkor — mint ismeretes — fennáll:

$$E\tau = I\lambda = h, \quad (1)$$

ahol E és I az energiát, ill. az impulzust, τ és λ az ezekhez hozzárendelt rezgésidőt, ill. hullámhosszat jelenti. Ezen képletekben ridegen tekint egymásra a fény és az anyag említett két felfogása. Míg az energia s az impulzus a részecskefogalomhoz tartozik, és így azok a tér-idő-koordináták segítségével kifejezhetők, a rezgésidő s a hullámhossz térben és időben határtalan síkhullámvonulattal áll kapcsolatban. Csak a szuperpozíció-elvre hivatkozva létesíthetünk összekötő kapcsot a szokásos leírásmóddal. Valóban, valamely hullámtér korlátozott tér-időbeli kiterjedése mindenkor felfogható mint harmonikus elemi hullámok valamely csoportján belül fellépő interferencia folyamánya. Amint azt *de Broglie* megmutatta [2], a hullámokhoz hozzárendelt individuumok translációs sebességét éppen az ún. csoportsebesség képviseli. Legyen egy elemi síkhullám

$$A \cos 2\pi(tv - x\sigma_x - y\sigma_y - z\sigma_z + \delta),$$

ahol A és δ az amplitúdót ill. a fázist meghatározó állandók. A $v=1/\tau$ mennyiség a rezgésszám, $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ az egyes koordinátatengelyek irányának megfelelő hullám-számok, melyek a tovaterjedés irányához tartozó $\sigma=1/\lambda$ hullámszám komponenseinek tekinthetők. Míg v/σ a hullám- vagy fázissebesség, a csoportsebességet $dv/d\sigma$ definiálja. A relativitáselmélet szerint valamely v sebességű részecskére

$$I = \frac{v}{c^2} E \quad \text{és} \quad v dI = dE,$$

ahol c a fénysebesség. Így tehát az (1) képlet szerint a fázissebesség c^2/v -vel, a csoportsebesség v -vel egyenlő. Az a körülmény, hogy az előbbi általában nagyobb mint a fénysebesség, egyrésztől közvetlenül rámutat ezen megfontolások szimbolikus jellegére. Másrésztől a részecskesebesség és a csoportsebesség azonosításának lehetősége a tér-időbeli szemléltetésnek a kvantumelméletben való alkalmazási körére mutat rá. Egyúttal megmutatkozik itt a leírás komplementer jellege is, minthogy a hullámcsoporthoz alkalmazása szükségszerűen elmosódottságot eredményez a rezgésidő és a hullámhossz definíciójában, s következésképpen az ezekhez az (1) összefüggésnek megfelelően hozzárendelt energia és impulzus definíciójában is.

Valamely korlátozott kiterjedésű hullámtér szigorúan véve csak v és $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ összes lehetséges értékeinek megfelelő elemi hullámok sokaságát szuperponálva állítható elő. A csoport két elemi hullámához tartozó ezen értékek különbségét azonban a legkedvezőbb esetben nagyságrendileg a

$$\Delta t \Delta v = \Delta x \Delta \sigma_x = \Delta y \Delta \sigma_y = \Delta z \Delta \sigma_z = 1$$

feltétel rögzíti, ahol $\Delta t, \Delta x, \Delta y, \Delta z$ a hullámtér kiterjedését adja meg az időben és a koordinátatengelyeknek megfelelő térirányokban. Ezek az optikai eszközök elméletéből — különösen *Rayleigh*nek a spektroszkópok felbontóképességére vonatkozó megfontolásai — jól ismert összefüggések annak feltételét fejezik ki, hogy a hullámvonulatok a hullámtér tér-időbeli határfelületén interferencia útján kioltassák egymást. Ez a feltétel akként is értelmezhető, hogy a hullámcsoporthoz mint egész nem jellemezhető valamely meghatározott fázissal abban az értelemben, amint ez az egyes elemi hullámokra áll. Az (1) képletből következik tehát:

$$\Delta t \Delta E = \Delta x \Delta I_x = \Delta y \Delta I_y = \Delta z \Delta I_z = h, \quad (2)$$

ami a hullámtérhez hozzárendelt individuumok energiájának és impulzusának

definíciójában elérhető legnagyobb pontosságot fejezi ki. Általában az energia és az impulzus valamelyik értékének az (1) képlet segítségével adott hullámtérhez való hozzárendelése esetében a viszonyok mindenesetre még kevésbé lesznek kedvezőek. Még ha a hullámcsoporthoz jellemzői kezdetben teljesítik is a (2) összefüggéseket, akkor is a csoport az idők folyamán kiterjedését tekintve olyan változásokon megy át, hogy az valamely individuum reprezentálására egyre kevésbé lesz megfelelő. De hisz éppen ezen körülményben gyökeredzik a fény és az anyagi részecskék természetének paradox jellege. Egyébként a klasszikus fogalmaknak a (2) összefüggéssel kifejezett korlátozottsága szorosan összefügg a klasszikus mechanika korlátozott érvényességével; a klasszikus mechanika az anyag hullámmélettében a geometriai optikának felel meg, melyben a hullámterjedés „sugarak” segítségével szemléltethető. Csak ebben a határesetben adható az energiára és az impulzusra tér-időbeli szemléletes képekből kiindulva egyértelmű definíció. E fogalmak általános meghatározásához közvetlenül a megmaradási tételekhez kell folyamodnunk, amelyek racionális megfogalmazása alapproblémáját képezte a később említendő szimbolikus módszereknek.

A relativitáselmélet nyelvén a (2) összefüggések tartalma azon kijelentésben foglalható össze, hogy a kvantumelméletben általános reciprok összefüggés áll fenn az individuumokhoz hozzárendelt tér-idő- ill. energia-impulzus-vektorok meghatározásának maximális élessége között. Ezt a tényállást úgy foghatjuk fel, mint egyszerű kifejezést annak, hogy a tér-időbeli leírás és a kauzalitás követelménye komplementer természetű. Ugyanakkor azonban ezen összefüggés általános jellege bizonyos mértékig lehetővé teszi, hogy a megmaradási tételeket a megfigyelések tér-időbeli leírásával összeegyeztessük, amennyiben ahelyett, hogy valamely tér-időpontban koincidáló jól definiált eseményekről beszélnénk, pontatlanul meghatározott individuumok találkozását állapítjuk meg véges tér-időtartományokban.

Ez a körülmény lehetővé teszi, hogy elkerüljük azokat a jól ismert paradoxonokat, amelyek a sugárzás szabad töltött részecskéken való szóródásának, valamint két részecske ütközésének leírására jellemzők. A klasszikus fogalmak szerint a szórás leírásához térben és időben véges kiterjedésű sugárzásra van szükség, ezzel szemben az elektron mozgásának a kvantumposztulátumtól kívánt megváltozása esetében — úgy látszik — pillanatszerű, a tér egy pontjában lejátszódó hatásról van szó. Hasonlóan a sugárzás esetéhez, az elektron esetében sem definiálható azonban impulzus és energia anélkül, hogy valamely véges tér-időtartományt ne vennénk tekintetbe. A megmaradási tételnek a folyamatra való alkalmazása feltételezi továbbá, hogy a sugárzás és az elektron energia-impulzus-vektorának definíciója ugyanolyan pontosságú. A (2) képletek szerint így a kölcsönhatáskor mindkét individuumhoz ugyanazon tér-időtartomány rendelhető hozzá.

Egészen hasonló megállapítások érvényesek két anyagi részecske ütközésére is; a hullámfelfogás nélkülözhetetlen voltának felismerését megelőzően a kvantumposztulátum jelentőségét mindenesetre nem méltatták figyelemre ezen jelenséggel összefüggésben. Ténylegesen itt ez a posztulátum a részecskék individualitásának a tér-időbeli leíráson túlmenő, a kauzalitás követelménye felé mutató feltételezését képviseli. Míg a fénykvantum-felfogás csupán az energia és az impulzus megmaradási tételén keresztül nyer világos tartalmat, a töltött elemi részecskéknél ebben a vonatkozásban még tekintetbe kell venni az elektromos töltés megmaradását is. Aligha kell külön megemlítenünk, hogy az egyes individuumok kölcsönhatásának behatóbb leírásánál nem elégedhetünk meg az (1) és (2) képletek útján kifejezett tényekkel,

hanem olyan segédeszközökhöz kell folyamodnunk, amelyek lehetővé teszik, hogy az ezen kölcsönhatás szempontjából mérvadó csatolást, ahol éppen az elektromos töltés jelentősége lép előtérbe, tekintetbe vegyük. Mint alább látni fogjuk, e segédeszközök azonban megkövetelik, hogy a megszokott értelemben vett szemléletes-ségről még messzebbmenően mondjunk le.

3. § Mérések a kvantumelméletben

A kvantumelméleti módszerek ellentmondásmentességére vonatkozó, már említett vizsgálataiban *Heisenberg* a (2) összefüggést ama lehető legnagyobb pontosság kifejezésére állította fel, amellyel valamely részecske tér-idő-koordinátái és energia-impulzus-értékei egyszerre megmérhetők. Eközben a következő megfontolásra támaszkodik. Egyrészt a részecske helye, mondjuk valamely optikai eszköz segítségével, bármily kívánt pontossággal megmérhető, hacsak a leképezéshez elég rövid hullámhosszúságú sugárzást használunk. A kvantumelmélet szerint azonban a sugárzásnak az objektumon való szóródása mindenkor véges impulzusváltozással jár együtt, mely annál nagyobb, minél kisebb a hullámhosszúság. Másrészt valamely részecske impulzusa, mondjuk a szórt sugárzás Doppler-effektusa segítségével elvégzett sebességmérés útján, bármily kívánt pontossággal megmérhető, hacsak a használt fény oly nagy hullámhosszúságú, hogy a visszalökődés elhanyagolható; ekkor azonban a helymeghatározás ennek megfelelően pontatlanná válik.

Ezen megfontolások magva: a kvantumposztulátum kikerülhetetlenségének hangsúlyozása a mérési lehetőségek megítélésénél. Szükséges lehet azonban ezzel kapcsolatban a definíciók előtt nyitva álló lehetőségek pontosabb vizsgálata, hogy a leírás komplementer jellegét kellő sokoldalúsággal kifejezésre juttathassuk. Hisz' önmagában a részecske energiájának és impulzusának az észlelési folyamat során fellépő diszkontinuus megváltozása nem gátolna meg bennünket abban, hogy mind a folyamat előtt, mind utána, a tér-idő-koordinátáknak, valamint az impulzusnak és energiának pontosan megadható értékeket tulajdonítsunk. Az a reciprok bizonytalanság, amely az ilyen értékek megadásához mindenkor hozzátapad, mint az a fenti diszkuszióból kitűnik, mindenek előtt azon korlátolt pontosság folyamánya, amellyel az energia- és impulzusváltozások definiálhatók, ha a megfigyeléshez használt hullámterek kiterjedése eléggé korlátozott a részecske tér-idő-koordinátáinak rögzítéséhez.

Valamely optikai eszköz segítségével elvégzett helymeghatározás esetében ezzel kapcsolatban szem előtt kell tartanunk, hogy a leképezés mindenkor valamely konvergens sugárnyaláb használatán alapszik. Ha λ a fény hullámhossza, úgy a mikroszkóp felbontóképeségét az ismert $\lambda/2\epsilon$ kifejezés adja meg, ahol ϵ az ún. numerikus apertúra, azaz a fél nyílásszög szinusza. Még ha az objektum megvilágítására párhuzamos fényt használunk is és így a beeső fénykvantum h/λ impulzusa irány szerint is ismert, a véges apertúra még ekkor is meggátol bennünket a szóráskor fellépő visszalökődés pontos ismeretében. Ha a részecske impulzusa a szórásfolyamat előtt pontosan ismert volt is, a tárgysíkba eső impulzuskomponensét illető ismeretünk a megfigyelés után így bizonytalansággal terhes, melynek nagysága nyilvánvalóan $2\epsilon h/\lambda$. Ama pontosságok szorzatát, melyekkel az adott irányba eső koordináta és impulzus megadható, így tehát éppen a (2) képlet fejezi ki. Azt gondolhatnánk, hogy a helymérés pontosságának megítélése szempontjából a hullámvonulatnak

nemcsak a konvergenciája, hanem a hossza is jelentőséggel bír, miután megeshetne, hogy a részecske a véges megvilágítási idő folyamán megváltoztatja helyzetét. Minthogy azonban a fény hullámhosszának pontos ismerete a fenti becslés szempontjából nem lényeges, könnyen belátható, hogy a hullámvonulat bármily apertura mellett oly rövidnek választható, hogy a részecske helyváltoztatása a megfigyelési idő alatt — ha azt a helymeghatározás pontosságának a felbontóképesség által definiált korlátjához viszonyítjuk — elhanyagolható.

A Doppler-effektus segítségével végzett impulzusmérés esetében — tekintettel a Compton-effektusra — alkalmasint párhuzamos hullámvonulat használatához folyamodunk. Azon pontosság szempontjából azonban, amellyel a szórt sugárzás hullámhosszváltozását mérni lehet, lényeges a hullámvonulatnak a tovaterjedés irányában való kiterjedése. Tegyük fel, hogy a beeső és a szórt sugárzás iránya azonos, ill. ellentétes a mérendő helykoordináta és impulzuskomponens irányával; ekkor a sebességmérés pontossága mértékének $c\lambda/2l$ tekinthető, ahol l a hullámvonulat hosszát jelöli. Itt az egyszerűség kedvéért feltettük, hogy a fénysebesség nagy a részecske sebességéhez képest. Ha m a részecske tömege, úgy az impulzus megadásához a megfigyelés után tapadó bizonytalanság $cm\lambda/2l$ -l egyenlő. Ebben az esetben a visszalökődés nagysága, $2h/\lambda$, eléggé jól definiált ahhoz, hogy a részecske impulzusának a megfigyelés után való megadásában ne eredményezzen észrevehető bizonytalanságot. Ténylegesen a Compton-effektus általános elmélete lehetővé teszi, hogy a sugárzás irányába eső sebességkomponenseknek az impulzusváltozás előtti és utáni értékét a beeső és a szórt sugárzás hullámhosszából kiszámítsuk. Ha azonban kezdetben a részecske helykoordinátái ismertek voltak is, az észlelés után a hely megadásában bizonytalanság fog fennállni. Minthogy ugyanis a visszalökődésnek nem lehet pontos időpontot tulajdonítani, a megfigyelés irányába eső közepes sebességet csupán $2h/m\lambda$ pontossággal ismerhetjük. A helymeghatározás pontossága a megfigyelés után ennél fogva $2hl/mc\lambda$. A hely- és az impulzusmérés pontosságának szorzatát itt is az általános (2) képlet adja meg.

Éppúgy mint a helymeghatározás esetében, a megfigyelés folyamatának tartama az impulzusmérés esetében is tetszőlegesen rövidde tehető, hacsak eléggé rövid-hullámú sugárzást használunk. Az, hogy ekkor a visszalökődés nagyobbá válik — mint láttuk —, nem befolyásolja a mérési pontosságot. Még helyénvaló megjegyezni, hogy ha itt ismételtlen valamely részecske sebességéről beszéltünk, úgy csupán arról van szó, hogy az adott összefüggésben célszerűen alkalmazkodtunk a szokásos tér-idő-leíráshoz. Amint az már *de Broglie* fent idézett megfontolásaiból kiviláglik, a sebesség fogalmát mindenkor elővigyázattal kell alkalmaznunk. Hisz' e fogalom egyértelmű definícióját a kvantumposztulátum is kizárja, amit különösen meg kell fontolnunk, ha több egymást követő megfigyelés eredményeit hasonlítjuk össze. Valamely individuum helye két adott időpontban természetesen bármely kívánt pontossággal megadható. Ha azonban ebből a megszokott módon az individuumnak a közbenső időközbeli sebességét akarjuk kiszámítani, úgy egy idealizációval van dolgunk, melyből az individuum korábbi vagy jövőbeli viselkedésére vonatkozóan nem lehet egyértelmű következtetéseket levonni.

Az individuumok tulajdonságainak definíciós lehetőségeire vonatkozó fenti fejtegetések értelmében valamely részecske helyének és impulzusának mérésekor elérhető pontosság diszkussziója szempontjából nyilván nem jelent különbséget, ha sugárzás szóródása helyett anyagi részecskékkal való ütközésekre hivatkozunk. Mindkét esetben azt látjuk, hogy a szóba jövő bizonytalanság éppannyira hozzátapad

a mérőeszköz leírásához, mint az objektuméhoz. Ez a bizonytalanság ténylegesen elkerülhetetlen, ha az individuumok viselkedését a szokott módon merev testekkel és megzavarhatatlan órákkal meghatározott koordináta-rendszerre vonatkoztatva írjuk le. A kísérleti feltételek — a diafragmák nyitása és zárása stb. — ugyanis csak arra adnak lehetőséget, hogy a hozzárendelt hullámterek téridőbeli kiterjedésére vonatkozóan vonjunk le következtetéseket.

A megfigyeléseknek érzékelésünkre való visszavezetésekor a kvantumposztulátum még egyszer szerephez jut, amikor a mérőeszköz jelzéseit észleljük, akár a szemre való közvetlen hatás révén, akár alkalmas segédeszköz — mint fényképezőlemez, Wilson-féle ködkamra stb. — közvetítésével. Könnyen belátható azonban, hogy az itt járulékosan fellépő statisztikus elem nem befolyásolja az objektum leírásának bizonytalanságát. Még az a sejtés is felmerülhet, hogy az önkény: mit tekintünk objektumnak és mit mérőeszköznek, lehetőséget nyit meg előttünk arra, hogy ezt a bizonytalanságot elkerüljük. Felmerülhet pl. a kérdés, hogy valamely részecskén optikai eszköz segítségével elvégzett helymérés esetében a szórásakor leadott impulzust nem lehetne-e meghatározni a megmaradási tétel segítségével azon impulzusváltozás méréséből, amelyet a mikroszkóp — a fényforrással és a fényképezőlemezrel együtt — a megfigyelés folyamata során elszenved. A behatóbb vizsgálat azt mutatja azonban, hogy ilyen mérés nem lehetséges, ha egyidejűleg elegendő pontossággal ismerni kívánjuk a mikroszkóp helyzetét. Ténylegesen az anyag hullámelméletében kifejezést nyert tapasztalatokból következik, hogy valamely test súlypontjának helyzete és összimpulzusa csak a (2) képlettel megadott pontossági határokon belül definiálható.

Szigorúan véve a megfigyelés fogalma a kauzális téridőbeli leíráshoz tartozik hozzá. A (2) összefüggés általános jellege folytán azonban ez a fogalom a kvantumelméletben is ellentmondásmentesen alkalmazható, hacsak az ezen összefüggésben kifejeződő bizonytalanságot tekintetbe vesszük. Mint *Heisenberg* hangsúlyozza, az atomi (mikroszkopikus) jelenségek kvantumelméleti leírásának tanulságos illuzzióját nyerjük, ha ezt a bizonytalanságot összehasonlítjuk azzal a bizonytalansággal, amely a természeti jelenségek szokásos leírásában a mérések tökéletlensége folytán minden megfigyeléshez hozzátapad. Ezzel kapcsolatban megjegyzi, hogy már a makroszkopikus folyamatok esetében mondhatjuk bizonyos értelemben, hogy ezek a bizonytalanságok ismételt megfigyelések folytán jönnek létre. Mindazonáltal nem szabad elfelednünk, hogy a klasszikus elmélet szerint minden egyes későbbi megfigyelés egyre nagyobb biztonsággal teszi lehetővé, hogy a jelenségek további lefolyását előre lássuk, amennyiben ezen megfigyelés a rendszer kezdeti állapotának mind pontosabb ismeretét jelenti. A kvantumelmélet szerint éppen a mérőeszközzel való, minden egyes megfigyeléskor fellépő el nem hanyagolható kölcsönhatás folytán jelentkezik egy teljesen új ellenőrizhetetlen elem. Amint az ugyanis a fenti fejtegetésekből kitűnik, valamely részecske helykoordinátáinak mérése nem egyszerűen véges megváltozását eredményezi a dinamikai változóknak; a részecske helyének rögzítése teljes mértékű szakítást jelent a dinamikai viselkedés kauzális leírásával, éppúgy, amint impulzusának ismerete mindenkor csak a téridőbeli tovahaladás nyomankövetésében támadó áthidalhatatlan hézag árán lehetséges. Éppen ez a körülmény hozza jól láthatóan napvilágra az atomi folyamatok kvantumelméleti leírásának komplementer jellegét, mely a kvantumposztulátum valamint az objektumnak és a mérőeszköznek a megfigyelés fogalmát jellemző szétválasztása között fennálló ellentét közvetlen következményének tekintendő.

4. § Korrespondencia-elv és mátrixelmélet

Eddig a kvantumelméleti problémáknak csak bizonyos általános vonásait vettük szemügyre. A dolog természete szerint a fő feladat azonban az, hogy az izolált részecske és a sugárzás absztrakciója által szimbolizált objektumok kölcsönhatási törvényeit megfogalmazzuk. Ehhez támpontokat mindenk előtt az atomszerkezet problémája szolgáltatott. Mint ismeretes, itt már a klasszikus fogalmak egyszerű alkalmazásával, közvetlenül kapcsolódva a kvantumposztulátumhoz, tapasztalásunk lényeges aspektusait lehetett megvilágítani. Ennek alapját mindenk előtt az a körülmény képezi, hogy e kérdések esetében a folyamatok tér-időbeli lefolyásának részletesebb leírásától el lehetett tekinteni. A színeképek elektronütközés vagy besugárzás útján történő gerjesztésével kapcsolatos kísérletek pl. racionális módon leírhatók diszkrét stacionárius állapotok és individuális átmeneti folyamatok feltelezésével.

Itt az ellentét a szokásos leírásmóddal különös élességgel lép előtérbe, amennyiben a színeképvonalak, melyeket a klasszikus felfogás szerint az atom ugyanazon állapotához kellene hozzárendelnünk, a kvantumposztulátum szerint különböző átmeneti folyamatoknak felelnek meg; a gerjesztés után az atom előtt nyitva áll a lehetőség az ezek között való választásra. A mondott ellentét ellenére sikerült mégis formális kapcsolatot létesíteni a klasszikus elgondolásokkal azokban a határesetekben, ahol a szomszédos állapotok tulajdonságainak relatív különbsége aszimptotikusan eltűnik és ahol statisztikus megfontolások céljára a diszkontinuitások elhanyagolhatók. Ez a kapcsolat lehetővé tette, hogy a kvantumelmélet alapján a színeképek törvényszerűségeit — az atomszerkezetre vonatkozó elgondolásainkkal összefüggésben — átfogó módon értelmezhesük.

A törekvés, hogy a kvantumelméletben a klasszikus elméletek racionális általánosítását ismerjük fel, vezetett el az ún. korrespondencia-elv felállításához. Ezen elv alkalmazása a színeképekből nyert eredmények értelmezésére a klasszikus elektrodinamika szimbolikus felhasználásán alapult; az egyes átmeneti folyamatok itt az atomi részecskék közönséges mechanika szerint várható mozgásának egy-egy harmonikus rezgési komponenséhez vannak hozzárendelve. Az említett határesetet kivéve, ahol az egymást követő stacionárius állapotok relatív különbsége elhanyagolható, a klasszikus elmélet ilyen „résztetekben való alkalmazása” mégis csupán bizonyos esetekben tette lehetővé a jelenségek szigorú kvantitatív leírását. Itt különösen a diszperziós jelenségek klasszikus tárgyalása, valamint a sugárzási jelenségekhez hozzárendelt átmeneti folyamatok *Einsteintől* kidolgozott statisztikus törvényei között *Ladenburg* és *Heisenberg* által létesített kapcsolatokra kívánunk emlékeztetni. Bár éppen a diszperziós probléma *Kramerstől* származó tárgyalása jelentőségteljes feltevéseket szolgáltatott a korrespondenciamegfontolások ésszerű továbbfejlesztéséhez, a korrespondencia-elvben foglalt törekvéseket csupán az utóbbi években megalkotott kvantumelméleti módszerek segítségével lehetett általánosságban keresztülvinni.

Mint ismeretes, az új fejlődési folyamat *Heisenberg* alapvető munkájával vette kezdetét, melyben sikerült teljesen megszabadulnia a klasszikus mozgásfogalomtól; a megszokott kinematikai és mechanikai mennyiségeket kezdettől fogva szimbólumokkal helyettesítette, melyek közvetlenül a kvantumposztulátum által megkövetelt individuális folyamatokra vonatkoznak. Ezt *Heisenberg* oly módon érte el, hogy valamely klasszikus mechanikai mennyiség idő szerinti Fourier-sorfejtését mátrix-

szkémával helyettesítette, melynek elemei tiszta harmonikus rezgéseket szimbolizálnak és a stacionárius állapotok között lehetséges átmenethez vannak hozzárendelve. Azon követelmény alapján, amely szerint az egyes elemekhez rendelt frekvenciák mindenkor eleget tartoznak tenni a színekpvonalak kombinációs elvének, mint *Heisenberg* megmutatta, egyszerű számítási szabályokra juthatunk, melyek lehetővé teszik a klasszikus mechanika alapegyenleteinek közvetlen kvantumelméleti átírását. Az atomelmélet dinamikai problémájának megoldására irányuló ezen merész és szellemes kezdeményezés kezdettől fogva rendkívül erőteljes és gyümölcsöző esz-közt adott kezünkbe a kísérleti eredmények kvantitatív értelmezésére. *Born* és *Jordan*, valamint *Dirac* közreműködésével az elmélet olyan megfogalmazást nyert, amely — zártságát és általánosságát tekintve — versenyre kelhet a klasszikus mechanikával. Sajátságos és figyelemre méltó körülmény, hogy a kvantumelméletre jellemző elem, a Planck-féle állandó, explicite csak ama számítási szabályokban lép fel, amelyeknek a szimbolumok alá vannak vetve. Azon mátrixokra, amelyek — a Hamilton-egyenleteknek megfelelő értelemben — kanonikusan konjugált változóknak felelnek meg, nem a kommutatív szorzás törvénye érvényes; két ilyen q, p mennyiségre a

$$pq - qp = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi} \quad (3)$$

felcserélési szabály érvényes, mely összefüggés átütő erővel juttatja kifejezésre az elmélet szimbolikus jellegét. A mátrixelméletet gyakran mint a közvetlenül megfigyelhető mennyiségekkel való számolást jellemzik. Meg kell azonban fontolnunk ezzel kapcsolatban, hogy a leírt eljárás éppen olyan problémákra van korlátozva, amelyek esetében a kvantumphosztulátum alkalmazásakor messzemenően le lehet mondani a tér-időbeli leírásról és így a megfigyelés kérdése a szó tulajdonképpeni értelmében háttérbe szorul.

A kvantumtörvények és a klasszikus mechanika korrespondenciájának további nyomkövetése szempontjából alapvető jelentőségű volt a kvantumelméleti leírás statisztikus jellegének hangsúlyozása, mely a kvantumphosztulátumból következik. Nagy előrehaladást jelentett itt a szimbolikus módszer *Dirac* és *Jordan* által megadott általánosítása; ebben lehetségessé vált olyan mátrixokkal dolgozni, amelyek nem a stacionárius állapotok szerint vannak elrendezve, hanem tetszőleges változók megengedett értékei léphetnek fel bennük a mátrixelemek indexeiként. Hasonlóan az elmélet eredeti alakjában fellépő „átlós elemek”-hez, melyek csak egy stacionárius állapotra vonatkoznak és a megfelelő mennyiség időbeli középértékeként értelmezhetők, a mátrixok általános transzformációelmélete is lehetővé teszi a mechanikai mennyiségek középértékeinek előállítását; ez utóbbiak kiszámításakor az állapotot jellemző változók közül némelyek adott értékekkel rendelkeznek, a kanonikusan konjugált változók viszont minden lehetséges értéket befutnak. Csatlakozva az ezen szerzőktől kidolgozott eljáráshoz, valamint *Born* és *Pauli* gondolataihoz, korábban már említett dolgozatában *Heisenberg* kísérletet tett a kvantumelmélet fizikai tartalmának behatóbb elemzésére, különös tekintettel a (3) felcserélési reláció látszólag paradox jellegére. Ebben az összefüggésben felállította a

$$\Delta q \Delta p \sim h \quad (4)$$

relációt, mely teljes általánosságban megadja a lehető legnagyobb pontosságot, amellyel két kanonikusan konjugált változót egyszerre meg lehet figyelni. Ily módon

Heisenbergnek sikerült igen érdekes módon megvilágítania egyes paradoxonokat, amelyek a kvantumposztulátum alkalmazásakor bukkannak fel, és átfogó módon igazolnia a szimbolikus módszer ellentmondásmentességét.

A kvantumelméleti leírás itt kiemelt komplementer természetével kapcsolatban — mint többször említettük — a leírás ellentmondásmentességének megítélésakor a megfigyelések és a definíciók számára nyitva álló lehetőségeket mindenkor együttesen kell szemügyre vennünk. Éppen e kérdés megvitatásával kapcsolatban jelentett — mint látni fogjuk — a hullámmechanika *Schrödingertől* kidolgozott módszere különösen nagy segítséget; ez kölcsönhatásban álló részecskék esetében is megengedi a szuperpozíció-elv alkalmazását és így közvetlen kapcsolatot tesz lehetővé a sugárzásra és a szabad részecskékre vonatkozó megfontolásokkal. A következőkben visszatérünk még a hullámmechanika, valamint a kvantumtörvényeknek a mátrixok transzformációelmélete segítségével megadott általános megfogalmazása között fennálló viszonyra.

5. § Hullámmechanika és kvantumposztulátum

Az anyagi részecskék hullámleírására vonatkozó megfontolásai során *de Broglie* kezdettől fogva rámutatott annak lehetőségére, hogy az atom stacionárius állapotai mint a kötött elektronokhoz rendelt parciális hullámok mutatta interferenciajelenség szemléltethetők. Kvantitatív vonatkozásban ez az új nézőpont először ugyan nem vezetett messzebbre, mint a kvantumelmélet régebbi, a klasszikus mechanika fogalmain alapuló módszereinek alkalmazása, melyeknek kidolgozásához különösen *Sommerfeld* járult hozzá. *Schrödinger*nek azonban sikerült olyan hullámelméleti módszert kimunkálnia, mely új távlatokat nyitott meg, és amelynek döntő jelentősége volt az atomelméletnek az utóbbi években elért nagy sikerei szempontjából. Mint ismeretes, a *Schrödinger*-féle hullámegyenlet sajátrezgései racionális leírását szolgáltatják az atom stacionárius állapotainak. Az egyes állapotok energiája a hozzárendelt rezgési periódussal az (1) általános kvantumelméleti összefüggésnek megfelelően áll kapcsolatban. A sajátrezgések csomópontjainak leszámllása egyszerű értelmezését adja továbbá a kvantumszám fogalmának, mely már a régebbi módszerekből is ismert volt, de a mátrix-megfogalmazásban csaknem nyoma veszett. Ezen kívül *Schrödinger* a hullámegyenlet megoldásaihoz folytonos elektromos töltés- és áramsűrűséget tudott hozzárendelni, melyek, ha azokat a sajátrezgésekre alkalmazzuk, reprodukálják az atom elektromos és mágneses tulajdonságait a megfelelő stacionárius állapotokban. Ugyanígy két sajátrezgés szuperpozíciójának folytonos eloszlású elektromos oszcilláció felel meg, melynek a klasszikus elektrodinamika szerint kiszámított sugárzása tanulságosan illusztrálja a kvantumposztulátum következményeit és a mátrixelmélet által a két stacionárius állapot között végbemenő átmeneti folyamatokra vonatkozóan megfogalmazott korrespondencia-követelményt. A *Schrödinger*-féle módszernek a további fejlődés szempontjából jelentős alkalmazását *Born* adta meg az atomok és szabad elektromosan töltött részecskék ütközésének problémájára vonatkozó vizsgálataiban. Ebben az összefüggésben sikerült neki megadnia a hullámfüggvény statisztikus értelmezését, mely lehetővé teszi a stacionárius állapotok között végbemenő, a kvantumposztulátumtól megkövetelt individuális átmeneti folyamatok valószínűségeinek kiszámítását. Ez egyben az *Ehrenfest*-féle adiabata-elv hullámmechanikai megfogalmazását is jelenti, melynek

gyümölcsöző volta különösen *Hund*nak a molekulaképződés problémájára vonatkozó sokat ígérő vizsgálataiból tűnik ki.

Tekintettel ezekre az eredményekre, *Schrödinger* annak a reményének adott kifejezést, amely szerint a hullámelmélet következetes kiépítése lehetővé tenné, hogy a kvantumposztulátumban bennefoglalt irracionalitást egészen elkerüljük és végül is az atomi jelenségek elméletét a klasszikus fizika elméleteinek irányelvei szerint építsük ki. Ezen felfogás alátámasztására újabban megjelent dolgozatában [3] *Schrödinger* azt a tényt hangsúlyozza, hogy amikor a kvantumposztulátumnak megfelelően diszkontinuus energiacseréről beszélünk, olyankor a hullámelmélet szerint egyszerű rezonancia-problémával állunk szemben. Az individuális stacionárius állapotokra vonatkozó elképzelés speciálisan csalódás volna, és a stacionárius állapot fogalmának alkalmazhatósága csupán az említett rezonanciát illusztrálná. Figyelembe kell azonban vennünk, hogy éppen az említett rezonanciaprobléma esetében zárt rendszerről van szó, ami az itt alapul vett felfogás szerint mindenfajta észlelést kizár. Ezen felfogás szerint a hullámmechanikát — éppúgy mint a mátrixelméletet — egyáltalán mint a megfelelő klasszikus mechanikai mozgásproblémának a kvantumelmélet következményeihez igazodó szimbolikus átírását kell felfognunk, mely csak a kvantumposztulátumra való explicit hivatkozás segítségével értelmezhető. Egyébként a kölcsönhatás problémájának kétfajta megfogalmazását, tekintettel kiindulópontjukra (hullám- ill. részecskefelfogás a szabad individuumok esetében), nevezhetjük komplementernek. Ezzel függ össze az a látszólagos ellentét is, amely az energiafogalomnak a két elméletben betöltött szerepe között mutatkozik.

Az elvi nehézségek, melyek a kölcsönhatásban álló részecskék valamely rendszerének klasszikus fogalmak segítségével történő téridőbeli leírása útjában állnak, nyomban kitűnnek, ha tekintetbe vesszük a szuperpozíció-elv nélkülözhetetlen voltát az egyes részecskék viselkedésének leírásában. Amint láttuk, az impulzus és energia ismerete már egy szabad részecske esetében is kizárja tér-idő-koordinátáinak pontos megadását. Ez maga után vonja, hogy az energiafogalomnak a rendszer potenciális energiájáról alkotott klasszikus elképzeléshez kapcsolódó közvetlen felhasználása nem lehetséges. A *Schrödinger*-féle hullámegyenletben ezeket a nehézségeket oly módon kerüljük el, hogy a *Hamilton-függvény* klasszikus kifejezését a

$$p = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial q} \quad (5)$$

összefüggés alapján differenciáloperátorral helyettesítjük; itt p általánosított impulzuskomponens, q pedig a kanonikusan konjugált változó. A negatív energia itt az idő konjugáltjának tekintendő. A hullámegyenletben az idő s a tér, valamint az energia s az impulzus egyelőre tisztán formális szerepet tölt be.

A *Schrödinger*-féle módszer szimbolikus jellege nem csak abból világlik ki, hogy egyszerűsége — ugyanúgy mint a mátrixelméleté — képzetes aritmetikai megnyilvánulások lényeges felhasználásán nyugszik. Mindenek előtt azonban már csak azért sincs szó közvetlen kapcsolatról megszokott szemléletünkkel, mert a hullámegyenlet által reprezentált „geometriai” probléma az ún. koordinátáttérrel áll kapcsolatban, melynek dimenziószáma egyenlő a rendszer szabadsági fokainak számával, és így a közönséges tér dimenziószámától, a 3-tól általában különbözik. Egyébként a kölcsönhatási problémának mind a *Schrödinger*-féle hullámegyenlettel, mind pedig a mátrix-quantumelmélettel adott megfogalmazására vonatkozik a korlátozás, mi-

szerint az alapul vett klasszikus mechanikai problémában az erőknek a relativitás-elmélettől megkövetelt véges terjedési sebessége figyelmen kívül marad.

A kölcsönhatás problémájával összefüggésben aligha jogos az igény a tér-időbeli képekhez kapcsolódó szemléletességre. Az atomok tulajdonságaira vonatkozó minden tapasztalatunk, amennyiben azok nem az atomnak mint egésznek a mozgását illetik, ténylegesen azok sugárzási és ütközési reakcióin alapszik. Eszerint a megfigyeléseket végső soron az üres térben haladó sugárzás és a szabad anyagi részecskék közvetítésével értelmezzük; ezekre az absztrakciókra épül a jelenségekről alkotott egész tér-időbeli felfogásunk, valamint az impulzus és az energia fogalmának definíciója. Ezen segédeszközök alkalmazásának megítélésénél egyedül az ellentmondásmentesség a döntő; itt mindenek előtt a definíciók és a megfigyelések lehetőségeit kell tekintetbe vennünk.

A Schrödinger-féle hullámegyenlet sajátrezgései éppen azért reprezentálják megfelelő módon az atom stacionárius állapotait, mert — az (1) általános kvantumrelációval együtt — lehetővé teszik a rendszer energiájának egyértelmű definícióját. Itt azonban a megfigyelések értelmezésekor a tér-időbeli leírást illetően van elkerülhetetlenül szükség messzemenő lemondásra. Mint látni fogjuk, a stacionárius állapotok fogalmának ellentmondásmentes alkalmazása kizárja minden közelebbi ismeretszerzés lehetőségét az atom egyes részecskéinek viselkedésével kapcsolatban. Az olyan problémák esetében, ahol e viselkedés leírása lényeges a megfigyelések értelmezéséhez, a hullámegyenlet általános megoldásának vizsgálatára vagyunk utalva, mely a sajátmegoldások szuperpozíciója alakjában állítható elő. Itt a definíciók lehetőségeinek komplementaritásáról van szó, mely hasonlóságot mutat a fény és a szabad anyagi részecskék tulajdonságainak korábban vizsgált kérdésével. Míg az individuumok energiájának és impulzusának definíciója a harmonikus elemi hullám fogalmával állt kapcsolatban, a jelenségek leírásának minden fajta tér-időbeli vonása, mint láttuk, interferencia tekintetbe vételén alapszik, mely az ilyen elemi hullámok egy csoportján belül játszódik le. A most szemügyre vett esetben is közvetlenül meg lehet győződni arról, hogy a megfigyelések és a definíciók lehetőségei között teljes az összhang.

A kvantumposztulátum szerint az elektron viselkedésének megfigyelését mindenkor az atom állapotának megváltozása kíséri. Amint azt *Heisenberg* hangsúlyozza, kis kvantumszámú stacionárius állapotokban tartózkodó atomok megfigyelésekor ez a megváltozás általában egyenesen a szóban forgó elektronnak az atomból való kivetését jelenti. Az elektron atombeli „pályájának” egymást követő megfigyeléseken alapuló leírása tehát az ilyen esetben kizárt. Ez azzal a körülménnyel függ össze, hogy kevés csomófelülettel rendelkező sajátrezgésekből nem építhető fel olyan hullámcsoport, amely valamely részecske „mozgását” akár csak közelítőleg reprezentálhatná. A leírás komplementer jellege azonban mindenek előtt a következőkben jut kifejezésre: a részecskék atombeli viselkedésére vonatkozó megfigyelések egyértelmű felhasználása mindenkor annak lehetőségén alapszik, hogy a megfigyelés folyamán a kölcsönhatást elhanyagoljuk és a részecskéket szabadnak tekintjük. Ez azonban megköveteli, hogy a folyamat időtartama rövid legyen az atom természetes periódusaihoz képest, ami a folyamat során átadott energiára vonatkozó ismeretünkben szükségképpen olyan bizonytalanságot eredményez, amely nagy a szomszédos stacionárius állapotok energiakülönbségeihez viszonyítva.

A megfigyelések lehetőségeinek megítélésével kapcsolatban általánosságban emlékeztetnünk kell arra, hogy a hullámmechanikai megoldásoknak csak annyiban

tulajdonítható szemléletes értelmezés, amennyiben azok a szabad részecskék fogalma segítségével leírhatók. Éppen itt kerül napvilágra a klasszikus mechanika és a kölcsönhatási probléma kvantumelméleti megfogalmazása között fennálló különbség. Az előbbieken az ilyen fenntartásra azért nincs szükség, mert hiszen itt a részecskének közvetlen „realitást” tulajdonítunk, függetlenül attól, hogy szabad-e vagy pedig kötött. Ezt a tényállást mindenek előtt a Schrödinger-féle elektromos sűrűségnek az elektronok adott atomi tartományában való tartózkodási valószínűsége mértékeként történő ellentmondásmentes felhasználásakor kell tekintetbe vennünk. Az említett fenntartás mellett ez az értelmezés közvetlenül visszavezethető a feltevésre, mely szerint valamely szabad elektron jelenlétének valószínűségét a hullámtérhez rendelt elektromos sűrűség hasonló módon határozza meg, mint valamely fénykvantum jelenlétének valószínűségét a sugárzásnak a hullámelmélet alapján kiszámított sűrűsége.

Mint már említettük, a klasszikus fogalmaknak a kvantumelméletben való általános ellentmondásmentes felhasználásához az eszközt a Dirac—Jordan-féle transzformációelmélet teremtette meg, melynek segítségével Heisenberg általános (4) bizonytalansági relációját megfogalmazta. Éppen ezen elméletben tanulságos alkalmazásra talált a Schrödinger-féle hullámeqyenlet is. Ténylegesen itt ezen egyenlet sajátmegoldásai mint segédfüggvények jelentkeznek, melyek azon mátrixokat, amelyek indexei a rendszer energiaértékei, olyan mátrixokkal összekötő transzformációt írnak le, amelyeknek indexei viszont a részecskék térkoordinátái. Ebben az összefüggésben érdekes azt is megemlíteni, hogy Jordannak és Kleinnek [4] újabban sikerült eljutnia a kölcsönhatás problémájának a Schrödinger-féle hullámeqyenletben foglalt megfogalmazásához oly módon, hogy az egyes részecskék hullámleírása alapján egy szimbolikus eljárást alkalmaztak, mely a sugárzás problémájának Diractól a mátrixelméletre támaszkodva kidolgozott mélyenszántó tárgyaláshoz kapcsolódik, és amelyre alább visszatérünk.

6. § *A stacionárius állapotok realitása*

A stacionárius állapotok fogalma esetében, mint már említettük, a kvantumposztulátum jellegzetes alkalmazásával van dolgunk. Ez a fogalom lényegének megfelelően az időbeli leírásról való teljes lemondást kíván. Az itt elfoglalt nézőpontból tekintve ez a lemondás feltétele annak, hogy az atom energiája egyértelműen definiálható legyen. Szigorúan véve a stacionárius állapot fogalma megköveteli, hogy kikapcsoljunk minden külső kölcsönhatást a rendszerhez nem tartozó individuumokkal. Az, hogy az ilyen zárt, rendszernek meghatározott energiaértéket tulajdonítunk, az energia megmaradásának tételében lefektetett kauzalitás-követelmény közvetlen kifejezésekként fogható fel. Ebben látjuk a kvantumposztulátum atomszerkezeti kérdésekre való alkalmazásának alapját képező, a stacionárius állapotok szupramechanikus stabilitására vonatkozó feltevés igazolását, mely feltevés szerint az atom bármely külső behatás előtt és után egyaránt jól meghatározott stacionárius állapotban tartózkodik.

Azon jól ismert paradoxonok megítélésével kapcsolatosan, amelyeket ez a feltevés az ütközési és sugárzási reakciókat illetően maga után von, lényeges tekintetbe venni a reakcióban szerepet játszó fogalmak definíciós lehetőségeinek a (2) összefüggéssel kifejezett korlátozottságát. Valóban, a reakcióba lépő individuumok

energiájának definíciója, amennyiben az elég pontos ahhoz, hogy a reakcióban energiamegmaradásról beszélhessünk, megkívánja, hogy ezen összefüggésnek megfelelően a reakcióhoz olyan időtartamot rendeljünk, amely hosszú az átmeneti folyamatokhoz rendelt, a stacionárius állapotok energiakülönbségeivel (1) szerint összefüggő időtartamokhoz képest. Ez a tényállás érdekes módon érvényesül azon folyamatok esetében, amelyek gyors részecskéknek az atomon való áthaladása során játszódnak le. Hisz' a közönséges kinematika szerint az effektív ütközési idő itt igen kicsiny volna az atomok természetes periódusához képest, a megmaradási tételnek a stacionárius állapotok stabilitásával való összeegyeztetése ennél fogva — úgy látszik — elvi nehézségekkel jár [5]. A hullámmechanikai leírásban ezzel szemben a tekintetbe jövő reakcióidő közvetlenül összefügg az ütköző részecske energiájára vonatkozó ismeretünk pontosságával, és a megmaradási tétellel való ellentmondásról soha nem lehet szó. Az itt tárgyalt fajta paradoxonokról folyó vitával kapcsolatban *Campbell* [6] javasolta, hogy magát az időt is lényegesen statisztikus fogalomnak tekintsük. Az itt képviselt felfogás szerint azonban, ahol is a tér-időbeli leírás alapja a szabad individuumok absztrakciójában keresendő, a relativitás-elmélet folyományaképpen az idő és a tér ilyen szétválasztása aligha vihető keresztül. Az időnek a stacionárius állapotok fogalmával kapcsolatosan elfoglalt különleges helyzete, mint láttuk, kétségtől a megfelelő problémák különleges jellegén alapszik.

A stacionárius állapotok fogalmának alkalmazása megkívánja, hogy mindenfajta — pl. ütközési vagy sugárzási reakciók segítségével végzett — megfigyelés esetén, mely lehetővé teszi, hogy a különböző stacionárius állapotok között különbséget tegyünk, jogosan eltekinthessünk az atom korábbi történetétől. Első pillantásra nehézségnek tekinthetnénk ezzel kapcsolatban, hogy a szimbolikus kvantumelméleti módszerek minden egyes stacionárius állapothoz egy-egy rezgési fázist rendelnek, mely — úgy látszik — a stacionárius állapotok eszméjének ellentmondó kapcsolatot létesít a rendszerre esetleg korábban kifejtett befolyással. De egyáltalán ha időtől függő problémával állunk szemben, szigorúan zárt rendszerről sohasem lehet szó. A tiszta harmonikus sajátrezgések felhasználása a megfigyelések értelmezésénél ténylegesen csak célszerű idealizáció szerepét tölti be; a pontosabb tárgyalás céljára ehelyett a harmonikus rezgések valamely véges frekvenciatartománynak megfelelő csoportja használandó. Mint már említettük, a szuperpozíció-elvnek általános folyománya, hogy valamely hullámcsoporthoz mint egész esetében sohasem beszélhetünk fázisról abban az értelemben, amint azt az egyes elemi hullámok vagy sajátrezgések esetében megtehetjük.

A fázisnak az optikai eszközök elméletéből jól ismert ezen megfigyelhetetlensége különösen egyszerűen jut érvényre a Stern—Gerlach-féle molekulásugár-kísérlet tárgyalásában, amely oly fontos eszközt jelent az egyes atomok tulajdonságainak vizsgálatára. Amint azt *Heisenberg* kifejtette, a térben különbözőképpen irányított atomok szétválaszthatóságának feltétele, hogy a sugarak eltérítése nagyobb legyen, mint az atomok haladó mozgásához rendelt de Broglie-hullámoknak a résen fellépő elhajlása. Mint egyszerű számítás mutatja, ez a feltétel azt kívánja, hogy az erőter befutásához szükséges időnek az egyes atomok erőterbeli energiájára vonatkozó ismeretünk bizonytalanságával (ez a sugárnyaláb véges szélességéből ered) képezett szorzata legalább is a hatáskvantummal legyen egyenlő. Ebben az eredményben *Heisenberg* ama reciprok bizonytalanságot kifejező (2) reláció támasztát pillantotta meg, amely az energia- és az időadatokhoz tapad. Meglehet azonban, hogy itt nem egyszerűen az atom energiájának a méréséről van szó adott időben. Minthogy azon-

ban az atom sajátrezgéseinek periódusa az erőterben az összenergiával az (1) általános összefüggésnek megfelelő kapcsolatban áll, látjuk tehát, hogy a szétválasztás említett feltétele éppen a fázis ismeretének elvesztését jelenti. Ez a körülmény lehetővé teszi, hogy elkerüljük a látszólagos ellentmondásokat, melyek egyes gyakrabban vitatott, *Heisenberg*től is tárgyalt, a rezonanciasugárzás koherenciájára vonatkozó gondolat kísérletekben felléptek.

Ha fent az atomról mint zárt rendszerről beszéltünk, úgy ez a sugárzás kibocsátásának elhanyagolását jelentette, amely külső behatás nélkül is határt szab a stacionárius állapotok élettartamára. Ezen elhanyagolás jogos volta sok alkalmazás esetében azzal függ össze, hogy az atom és a sugárzási tér között a klasszikus elektrodinamika szerint várható csatolás általában igen gyenge a részecskék között az atomban uralkodó csatoláshoz képest. Ténylegesen meg van rá a lehetőség, hogy az atom állapotának leírásakor a sugárzás visszahatását elhanyagoljuk, figyelmen kívül hagyva az energiaértékek elmosódottságát, mely a stacionárius állapotok élettartamával a (2) összefüggésnek megfelelő kapcsolatban áll [7]. Éppen ezen alapszik annak lehetősége, hogy a klasszikus elektrodinamika alapján következtetéseket vonjunk le a sugárzás természetére nézve.

A sugárzás problémájának tárgyalása az új kvantumelméleti módszerek szerint kezdetben éppen a korrespondencia-megfontolás kvantitatív felhasználását jelentette. Ez volt éppen az eredeti *Heisenberg*-féle megfontolások kiindulópontja. A sugárzási jelenségek *Schrödinger*-féle tárgyalásának tanulságos, a korrespondencia-elvre támaszkodó elemzését újabban *Klein* adta [8]. A szigorúbb, *Diractól* [9] megalapozott tárgyalás esetében a sugárzási teret a vizsgálni kívánt zárt rendszer részeként vesszük tekintetbe. Ennek alapján lehetővé vált, hogy a sugárzási folyamatoknak a kvantumelmélettől megkívánt individuális jellegéről racionális módon számot adjunk, és olyan diszperziós elméletet építsünk ki, amely figyelembe veszi a színekpvonalak véges szélességét. A tér-időbeli szemléletességről való lemondás, mely e tárgyalást jellemzi, nyomatékka utal a kvantumelméleti leírás komplementer természetére. Ugyancsak messzemenően szem előtt tartandó ez a komplementer jelleg a kauzális leírásmódtól való a sugárzási jelenségek esetében megmutatkozó éles eltérések megítélésakor, amelyekre a színekpek gerjesztésével kapcsolatban fent utaltunk.

Tekintettel a korrespondencia-elvtől az atomok tulajdonságainak leírása és a klasszikus elektrodinamika között megkívánt aszimptotikus kapcsolatra, úgy vélhetnénk, hogy a körülmény, miszerint a stacionárius állapotok fogalma, valamint az egyes részecskék atombeli viselkedésének leírása egymást kölcsönösen kizárja, nehézséget jelent. Hiszen ez a kapcsolat azt jelenti, hogy az elektronmozgás mechanikai képét racionális módon alkalmazhatjuk a nagy kvantumszámok határesetében, hol a szomszédos stacionárius állapotok relatív különbsége aszimptotikusan eltűnik. Itt azonban korántsem valamiféle folytonos átmenetről van szó, mely a klasszikus elmülethez vezet, ahol is a kvantumposztulátum fokozatosan feleslegessé válik. Éppen ellenkezőleg, a következtetéseknek, melyeket a klasszikus képek segítségével a korrespondencia-elvből le lehetett vonni, éppen a stacionárius állapotok és az individuális átmeneti folyamatok fogalmának ezen határesetében is érintetlen fenn-tartása képezte az alapját.

E kérdéssel kapcsolatban az új módszereket tanulságosan lehetett alkalmazni. Amint azt *Schrödinger* igazolta [10], az említett határesetben sajátrezgések szuperpozícióját képezve olyan hullámcsoprtok szerkeszthetők, amelyek kiterjedése kicsiny az atom „méreteihez” képest, és amelyek tovaterjedése a mozgó anyagi részecs-

kékre vonatkozó klasszikus elképzelést tetszőlegesen megközelíti, hacsak a kvantum-számokat elég nagyra választjuk. A harmonikus oszcillátor különlegesen egyszerű esetében *Schrödinger* meg tudta mutatni, hogy az ilyen hullámcsoportok akár korlátlan ideig is együttmaradnak és oly módon oszcillálnak ide-ode, amely a mozgás klasszikus képének felel meg. E körülményben *Schrödinger* támaszt vélt felismerni a remény számára, miszerint ki lehetne építeni az anyag tiszta hullámmélettét anélkül, hogy a kvantumposztulátumra hivatkoznánk. Amint azt azonban *Heisenberg* részletesebben kifejtette, az oszcillátor esetében uralkodó egyszerű viszonyok kivételt képeznek, ami a megfelelő klasszikus mozgás tisztán harmonikus jellegével függ össze. Itt sem a szabad részecskék problémájába való folytonos átmenetről van szó. Az általános esetben a hullámcsoportok folyamatosan szétterjeszkednek az atom egész térfogatára, s egy kötött elektron mozgását csupán néhány körülkeringés folyamán lehet nyomon követni; ezek számát nagyságrendileg a sajátrezgésekhez rendelt kvantumszámok adják meg. Ezt a kérdést újabban részletesen vizsgálta *Darwin* [11], több tanulságos példát adva a hullámcsoportok viselkedésére. A mátrixelmélet szemszögéből tekintve *Kennard* [12] tárgyalt hasonló problémákat.

Itt tehát ismét a hullámméleti szuperpozíció-elv és a részecskék individualitása között fennálló ellentétet találjuk magunkat szemben, melyet már a szabad részecskék esetében megismertünk. Egyszersmind a klasszikus mechanikával fennálló aszimptotikus kapcsolat, mely nem ismer elvi különbséget szabad és kötött részecskék között, lehetőséget ad a stacionárius állapot fogalmának ellentmondásmentes alkalmazását illető fenti fejtegetések különösen egyszerű illusztrálására. Amint láttuk, valamely stacionárius állapotnak ütközési vagy sugárzási reakciók segítségével történő kimutatása az időbeli összefüggések nyomankövetésében hézag felléptét követeli meg, mely nagyságrendben legalább akkora, mint a szomszédos stacionárius állapotokat összekötő átmeneti folyamatokhoz rendelt periódusok. A nagy kvantumszámok határesetében éppen e periódusok értelmezhetők a keringés periódusaként. Látjuk tehát: kizárt, hogy kauzális kapcsolatot állapítsunk meg valamely stacionárius állapot kimutatására lehetőséget adó megfigyelés, valamint az egyes atomi részecskék viselkedésére vonatkozó korábbi megfigyelések között.

Összefoglalásképpen minden bizonnyal mondhatjuk, hogy a stacionárius állapotok valamint az individuális átmeneti folyamatok fogalmának — alkalmazhatóságuk tartományán belül — épp annyira vagy éppoly kevésbé tulajdonítható realitás, mint maguknak az individuális részecskéknek. Mind az egyik, mind a másik esetben kifejezésre juttattuk a — téridőbeli leírásmódhoz képest komplementer — kauzalitás-követelményt, melynek racionális alkalmazását csak a szereplő fogalmak definíciós lehetőségei korlátozzák.

7. § Az elemi részecskék problémája

Ha tekintetbe vesszük a komplementaritás vonását, melyet a kvantumposztulátum megkíván, ténylegesen lehetségesnek látszik, hogy a szimbolikus módszerek segítségével kiépítsük az atomi jelenségek ellentmondásmentes elméletét, mely a közönséges kauzális tér-időbeli leírás racionális általánosítását képezi. Ez azonban nem jelenti azt, hogy a klasszikus elektronelmélet egyszerűen mint az eltűnő hatáskvantumnak megfelelő határeset fogható fel. A tapasztalattal való kapcsolat, melynek megállapítására ezen elmélet alapján törekedtünk, olyan feltevéseken nyugszik,

amelyek a kvantumelmélet problémakörétől aligha választhatók el. Erre utalással szolgáltak már a töltött elemi részecskék individualitásának és a mechanika s az elektrodinamika elveinek összeegyeztetésével kapcsolatos ismert nehézségek. Ebben a vonatkozásban az általános gravitációelmélet — amint az a relativitáselméletben megfogalmazást nyert — sem váltotta be a vele szemben táplált reményeket. Az itt érintett kérdések megnyugtató megoldása csak az általános térelmélet értelemszerű új értelmezésétől várható, amelyben az elemi töltés kvantuma megkapja természetes helyét; ezáltal kifejezést nyerne az individualitásnak a kvantumelméletet jellemző vonása. Újabban *Klein* [13] rámutatott annak lehetőségére, hogy ezt a problémát összefüggésbe hozzuk az elektromágnesség és a gravitáció *Kaluzától* származó öt-dimenziós egységes leírásával. Ebben az elméletben az elektromos töltés megmaradása analógja az energia- és impulzusmegmaradás tételének. Éppúgy, ahogy az utóbbi fogalmak az atomi jelenségek leírása során a téridőbeli leírással komplementer viszonyban állnak, azonképpen — mint azt *Klein* hangsúlyozza — meglehet, hogy a megszokott négydimenziós leírás alkalmas volta, valamint annak szimbolikus kvantumelméleti felhasználása lényeges módon azon alapszik, hogy abban az elektromos töltés mindenkor mint jól meghatározott elemi kvantum jelenik meg, és a konjugált ötödik dimenzió ennél fogva a tapasztalatok értelmezésében nem lép fel közvetlenül.

Ezen mélyenfekvő, megoldatlan problémáktól teljesen eltekintve, a klasszikus elektronelmélet egészen a legutóbbi időkig vezérfonálul szolgált a korrespondenciaszerű leírás további kiépítésének, mégpedig az elsősorban *Comptontól* kimondott gondolattal kapcsolatban, amely szerint az elemi részecskéknek tömegük és töltésük mellett még mágneses momentumot is kell tulajdonítanunk, mely a hatáskvantum által meghatározott impulzusmomentumtól származik. Ez a feltevés, melyet *Goudsmit* és *Uhlenbeck* átütő sikerrel vezetett be az anomális Zeeman-effektus eredetének diszkussziójába, az új módszerekkel kapcsolatosan — amint azt különösen *Heisenberg* és *Jordan* meg tudta mutatni — messzemenően beigazolódott. Egyenesen azt mondhatjuk, hogy a mágneses elektron feltevése a többielektronos atomok viselkedésének kvantumelméleti leírásában fellépő, a *Heisenberg*től [14] tisztázott rezonancia-problémával együtt a színeképek és a periódusos rendszer törvényszerűségei korrespondenciaszerű értelmezésének bizonyos mértékű lezárását eredményezte. Sőt, az ezen előrehaladás alapjául szolgáló elvek utat nyitottak az atommagok tulajdonságaira vonatkozó következtetések levonásához. Így újabban *Dennisonnak* [15] *Heisenberg* és *Hund* gondolataihoz kapcsolódva sikerült megmutatnia, miképpen kerülhetők el a nehézségek, melyek eddig a hidrogén fajhőjével kapcsolatban jelentkeztek, amennyiben feltesszük, hogy a protonnak az elektronéval megegyező impulzusmomentuma van. Tekintettel azonban a proton nagyobb tömegére, a mágneses momentumnak, melyet neki tulajdonítunk, az elektronénál sokkal kisebbnek kell lennie.

Az eddigi módszerek elégtelen volta az elemi részecskék problémáinak megoldására az imént tárgyalt kérdésekkel kapcsolatban kiviláglik abból, hogy azok a töltött elemi részek és a fénykvantum-felfogás szimbolizálta „individuumok” viselkedésében mutatkozó, a *Paulitól* felállított ún. kizárási elvben kifejezést nyert különbözőség egyértelmű megalapozását nem teszik lehetővé. Hisz’ ezen — az atomszerkezet és a statisztikus elméletek legújabb fejlődése szempontjából oly gyümölcsöző — elv esetében több elgondolható lehetőség egyikével van dolgunk, amelyek mindegyike egymagában eleget tenne a korrespondencia-elv követelményeinek. Egyéb-

ként a mágneses elektron esete különösen tanulságos példa arra, hogy milyen nehézségekkel jár a relativitáselmélet követelményének a kvantumelméletben eleget tenni. Így *Darwin*nak és *Pauli*nak a kvantumelméleti módszerek ezen probléma tárgyalására alkalmas általánosítását célzó sokat ígérő feltevéseit mindeddig lehetetlennek bizonyult összhangba hozni a *Thomastól* származó relativisztikus kinematikai megfontolással, mely olyan lényegesnek bizonyult a kísérleti eredmények magyarázatához. A legutóbbi időben azonban *Dirac*nak [15] sikerült a mágneses elektron problémáját megragadnia a szimbolikus módszer újszerű, rendkívül szellemes kiterjesztésével, mely — miközben megőrzi az egyezést a spektrális jelenségekre vonatkozó tapasztalatokkal — tekintetbe veszi a relativitáselmélet követelményét. A problémának ez a megközelítése nem csupán az eddigi eljárásnak a képzetes mennyiségek használata által jellemzett komplexitására támaszkodik, hanem az alapegyenletekben olyan számtesteket is felhasznál, amelyek komplexitása még magasabb fokú.

A relativisztikus érvelésmód már megfogalmazásában — megfelelően lényegének — feltételezi a tér-idő-koordinációnak és a kauzalitás követelményének a klasszikus elméletekre jellemző egyesítését. Ezért a relativitáselvnek a kvantumposztulátumhoz való racionális hozzáidomításakor még nagyobb mértékű lemondásra kell elkészülnünk a megszokott értelemben vett szemléletességről, mint az itt tárgyalt kvantumelméleti módszerek esetében. Ténylegesen itt azon az úton haladunk, amelyre *Einstein* lépett rá, és amely az érzéki benyomásainktól kölcsönzött szemléleti formáinknak a természettörvények egyre mélyülő ismeretéhez való hozzáidomítása felé vezet. Az akadályok, amelyekkel ezen az úton találkozunk, mindenek előtt abból erednek, hogy a nyelvnek úgyszólván minden szava ezen szemléleti formákhoz kapcsolódik. A kvantumelméletben ez a nehézség azonnal eléünkbe lép az irracionalitásnak a kvantumposztulátumban benne rejlő vonása elkerülhetetlenségének kérdésében. Mindazonáltal remélem, hogy a komplementaritás fogalma alkalmas lesz a fennálló helyzet jellemzésére, mely alighanem mély analógiát mutat az emberi fogalomalkotás általános, a szubjektum és objektum elválasztásán alapuló nehézségeivel.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM

- [1] *Zeitschr. f. Phys.* **43**, 172, 1927 (*Magy. Fiz. Foly.* **15**, ..., 1967).
- [2] *Disszertáció*, Párizs, 1924.
- [3] *Ann. d. Phys.* **83**, 956, 1927.
- [4] *Zeitschr. f. Phys.* **45**, 751, 1927.
- [5] *Zeitschr. f. Phys.* **34**, 142, 1925.
- [6] *Phil. Mag.* **1**, 1106, 1926.
- [7] *Zeitschr. f. Phys.* **13**, 117, 1923.
- [8] *Zeitschr. f. Phys.* **41**, 407, 1927.
- [9] *Proc. of the roy. soc. of London*, Ser. A **114**, 243, 1927.
- [10] *Naturwissenschaften*, **14**, 664, 1926.
- [11] *Proc. of the roy. soc. of London*, Ser. A **117**, 258, 1927.
- [12] *Zeitschr. f. Phys.* **44**, 326, 1927.
- [13] *Zeitschr. f. Phys.* **46**, 188, 1927.
- [14] *Zeitschr. f. Phys.* **41**, 239, 1927.
- [15] *Proc. of the roy. soc. of London*, Ser. A **115**, 483, 1927.

KÖNYVISMERTETÉS

W. Walcher: *Praktikum der Physik*. B. G. Teubner Stuttgart

1966. 327 oldal, 178 ábra, 10 táblázat

Egy modern gyakorlati kézikönyv feladata sokat és sokak által vitatott kérdés. Vajon idejét múlták-e a klasszikus mérések (analmérleg, tükrös galvanométer stb.), vajon az „apró” elvi kérdésekkel „bibelődő” fizikusan kívül érdekelhetnek-e egyáltalában másokat a fizikai mennyiségek mérése, egyes elemi törvényszerűségeinek kísérleti kimutatása? Nem szükségképpen más praktikumon kell átesniük a „modern”, a „nagy” összefüggéseket kereső fizikusoknak, a jövődő atom-, űrfizikusnak, vagy még inkább a fizikát egyre inkább gyakorlatilag felhasználó mérnöknek, kémikusnak, gyógyszerésznek vagy orvosnak? Nem helyesebb-e az egyetemi fizikai gyakorlatokon az oktatást pl. a tömegspektroszkóp, az elektronmikroszkóp, a rezonanciamódszerek kísérleti elsajátítására alapozni, modern mérőberendezések praktikumán nevelni fel az új nemzedéket?

Walcher nem ezen a nézetten van. Könyve határozottan klasszikus, de modern folytatója annak a sorozatnak, amelynek kiemelkedő nagy enciklopédiája Kohlrausch kétkötetes munkája. Ez azonban nem azt jelenti, hogy Walcher könyve nem jelent előrelépést. Könyvének terjedelme alig több mint 300 kis oldal, melynek mondanivalója közel 100 jól kiválasztott mérés köré csoportosul, amelyek között helyet kap a dózismérés és a sugárvédelem problémája is. Felhasználóit a matematikai gondolkodás elsajátítására szeretné nevelni, ezért igényesebb munka, mint egy szokványos kis kézikönyv. Jelöléseiben, nomenklatúrájában a IUPAP SUN bizottságának elveit érvényesíti.

Magyarországon Walcher könyvét elsősorban a tudományegyetemek természettudományi tagozatain, a speciális középiskolai és technikai osztályokban használhatják fel. A hazai fejlődés mind a mérnök, mind a gyógyszerészképzés, mind az orvosképzés területén némileg más utat mutat.

(T. Gy.)

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1966. XII. 11. — Példányszám: 550 — Terjedelm: 9.1 (A/5) iv

67-6454 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:

43-790-057-181) útján eszközölhetők

1955
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Hordós Miklós</i> : Röntgensugárzás és radioaktív sugárzások dózismérése kalorimetrikus módszerrel	109
<i>Kovács István</i> : A képlékeny alakváltozás mechanizmusának vizsgálata felületcentrált kőbős fémeken	125
<i>Berényi Dénes</i> : Az alapvető kölcsönhatásokkal kapcsolatos új eredmények a magspektroszkópiában	173

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>N. Bohr</i> : A kvantumposztulátum és az atomisztika újabb fejlődése	193
---	-----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Abonyi Iván</i> : B. Grycz: Fourth State of Matter	124
<i>Abonyi Iván</i> : Milan Marvan: Negative Absolute Temperatures	124
<i>T. Gy.</i> : W. Walcher: Praktikum der Physik	212

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Iyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközrel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

AZ (n , gamma)-REAKCIÓK KÍSÉRLETI TANULMÁNYOZÁSA*

KISS DEZSŐ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

I.

Bevezetés

A magfizika alapvető feladata a magerők és az atommag felépítésének, tulajdonságainak megismerése, megmagyarázása. Mivel egyrészt a magerők egzakt természete nem ismert pontosan, másrészt a sok nukleonból álló atommag által felvetett többtest probléma ma még csak durva közelítésekkel és így is csak rendkívül nehezen tárgyalható, — modellszerű elképzelésekre vagyunk utalva. Ezek a modellek a valóság egyik vagy másik lényeges vonását alapjában véve helyesen tükrözik és éppen ezért elvárható tőlük, hogy segítségükkel a valósághoz közeleső információt nyerjünk, — ugyanakkor természetszerűleg sok leegyszerűsítést és elhanyagolást tartalmaznak, ezért érvényességük korlátozott. A modellek alapján kialakított elméletek próbaköve az atommagok alpnívója és gerjesztett nívói különböző tulajdonságainak (mint például energia, élettartam, spin, paritás, mágneses momentum, kvadrupól momentum, stb.) kísérleti értéke. Kísérleti oldalról közelítve tehát a fenti jellemzőket kell megmérnünk és összevetnünk a modell által szolgáltatott elméleti értékekkel. A modellek ellenőrzése és teljesítőképességük megállapítása szempontjából érthetően nagyon fontos lehetőleg sok mag minél több nívójának paramétereit kísérletileg meghatározni. A modell alapján várt értékkel nem egyező mért értékek teszik szükségessé az elmélet továbbfejlesztését és egyúttal a továbbfejlesztés irányára vonatkozóan is adnak támpontot.

A gerjesztett nívók tulajdonságainak vizsgálata természetszerűleg megkívánja a magok gerjesztését. Gerjesztett állapotú magokat kapunk pl. radioaktív bomlás során: az így elérhető gerjesztett nívók általában az alapállapot körüli 2—3 MeV-os tartományban találhatók. A magasabban fekvő nívók magreakciók segítségével gerjeszthetők. A magreakciók között speciális helyet foglalnak el a neutronok által kiváltott magreakciók, mivel a neutronokra nem hat a Coulomb-gát és így a gerjesztés nagyon kis kinetikus energia értékekkel is megvalósítható. Töltött részecskével való gerjesztésnél a Coulomb-gát leküzdése érdekében a töltött részecskének nagy kinetikus energiával kell rendelkeznie és így a mag általában magasan, gyakran a kontinuum-tartományban gerjesztődik. A lassú-neutron kiváltotta reakciók segítségével tehát a radioaktív bomlással elérhető tartománynál magasabb, a töltött rész reakciókkal elérhetőnél pedig alacsonyabb energiatarományban fekvő gerjesztett nívók érhetők el.

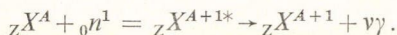
A neutronok, mint bombázó részek segítségével a legkülönbözőbb kimenő csatornával rendelkező magreakciók válthatók ki. A lehetséges reakciók széles skálája energetikai okokból leszűkül, ha csak termikus vagy rezonancia-neutronokra korlátozódunk. Ez utóbbi esetben a következő reakciók lehetségesek:

* Érkezett: 1966. aug. 25.

rugalmas szórás (n, n),
sugárzásos befogás (n, gamma),
hasadás (n, f) és
töltött rész emisszió ($n, \text{töltött}$).

Az, hogy a fenti reakciók közül melyik milyen relatív valószínűséggel valósul meg, függ a targetmag tömegétől. A bennünket közelebből érdeklő (n, gamma)-reakció az egész periódusos rendszerben lehetséges (egyetlen kivételt képez a He^4), azonban domináló folyamattá a nehézmagoknál válik. Az (n, gamma)-reakciók hatáskeresztmetszeite konkrét esetenként széles skálában változhat: 10^{-3} — 10^5 barn között.

A továbbiakban a cikk témáját képező (n, gamma)-reakciókkal foglalkozunk.* Az (n, gamma)-reakciónál a következő folyamat megy végbe:



A keletkezett gerjesztett mag (X^*) a neutron kötési energiájának megfelelő gerjesztési energiával rendelkezik (általában 7—10 MeV). A legerjesztődés egy vagy több (ν), egymást kaszkádszerűen követő gamma-kvantum kibocsátásával történik.

Ha megmérjük az emittált gamma-kvantumok különböző tulajdonságait, információt nyerhetünk az általuk érintett gerjesztett nívók bizonyos magfizikai jellemzőiről. Így pl. a gamma-energiaszpektrum mérése lehetővé teszi a legerjesztődés során érintett nívók energiájának és — más mérésekkel kiegészítve — a nívósémának a meghatározását. Az egyes nívók spinértékét, illetve az átmenetek multipolaritását tudhatjuk meg akkor, ha megmérjük a kérdéses nívóra érkező és a nívóról eltávozó két gamma-kvantum szögkorrelációját, vagy ha megmérjük a befogási állapotból a kérdéses nívóra vezető gamma-kvantum cirkuláris polarizációját. Merve két egymást követő gamma-kvantum késleltetett koincidenenciáit, meghatározható a közbenső nívó élettartama. Az átmenet multipolaritására következtethetünk a mért élettartamból, vagy az átmenet intenzitásából; ugyancsak a multipolaritásra illetve az átmenet jellegére (elektromos vagy mágneses) következtethetünk a belső konverziós elektronspektrum alakjából, illetve a belső párképzésnél keletkezett elektron-pozitron pár szögeloszlásából. Előfordulhat, hogy a neutronbefogás után keletkezett mag valamelyik nívója metastabil és felezési ideje nagy. Ez esetben megmérhetjük a metastabil és az alapállapot neutronbefogás után kialakult relatív populációját, az ún. izomér hatáskeresztmetszet viszonyt (σ_m/σ_g), amiből viszont meghatározható a nívók impulzusmomentum szerinti eloszlását jellemző paraméter.

Az említett esetekben a radioaktív bomlás tanulmányozásánál már kialakult, tágabb értelemben vett gamma-spektroszkópiai módszerek magreakció esetére való alkalmazásáról van szó. Ez az (n, gamma)-reakciók vizsgálatának egy lehetséges módja, a gamma-spektroszkópiai oldalról való közelítés, amely bizonyos analógiát mutat az optikából ismert emissziós spektroszkópiával: a vizsgálat tárgyát képező objektum által kibocsátott sugárzás különböző tulajdonságainak méréseiből következtetünk vissza az objektum sajátosságaira. Ezzel a módszerrel a befogási nívó alatti gerjesztett nívók tanulmányozhatók.

Lehetséges a problémának egy másik, neutron-spektroszkópiai megközelítése is, ami — az analógiát továbbvive — az abszorpciós spektroszkópiával rokon: ennél neutron-spektroszkópiai módszerekkel vizsgáljuk az (n, gamma)-reakciót

* Az (n, gamma)-reakciókról több összefoglaló munka jelent meg: ilyen pl. [Ba60b, Ba61, De63, Lo65].

kiváltó neutron abszorpcióját a neutron energiájának függvényében és a mért hatáskeresztmetszetekből, azok rezonanciaszerű viselkedéséből és a rezonanciára jellemző paraméterekből vonunk le következtetést a mag tulajdonságaira. A neutron-spektroszkópiai vizsgálatok igen nagy relatív energia pontossággal történhetnek, mivel a neutron kinetikus energiáját módunkban van elektronvolt nagyságrendű értékekkel változtatni, de ez a változtatás a mag energia-skálájában a kötési energiának megfelelő 7–10 MeV tartományban történik. Ily módon mintegy „ablakon” keresztül nagy pontossággal tanulmányozhatjuk a kötési energia fölötti tartományt, kb. 1 keV szélességben. Nemrégiben olvashattunk az irodalomban [In 65] egy érdekes javaslatot ennek a tartománynak a kiszélesítésére (l. VIII.).

Magspektroszkópiai szempontból bizonyos értelemben az (n , gamma)-reakciókkal analóg jellegűek és párhuzamba állíthatók a (p , gamma)-reakciók. Bár sok vonatkozásban hasonló jellegű információkat nyerhetünk, mégis több szempontból különbözik e két reakció magspektroszkópiai felhasználhatósága. A (p , gamma)-reakciók lehetővé teszik a közbenső mag különböző paritású és spinű nívóiról való átmenetek egyidejű tanulmányozását, mivel a termikus (n , gamma)-reakciókkal ellentétben nemcsak $l=0$ pályamomentummal történhet a befogódás. Hasonló okokból a (p , gamma)-reakciók esetében a gamma-sugarak szögeloszlása hasznos spin információkat szolgáltathat, míg az (n , gamma)-reakciónál a termikus neutronok s -jellegű befogódása miatt a beeső neutron irányához képest a gamma-sugárzás irányeloszlása izotróp. Más oldalról viszont az (n , gamma)-reakciók vannak előnyös helyzetben: sokkal kedvezőbbek az intenzitásvizonyok, továbbá a Coulomb-gát hiánya miatt nehézmagok is tanulmányozhatók. Egyébként általában nem lehetséges ugyanannak a végmagnak (n , gamma)- és (p , gamma)-reakciókkal való tanulmányozása, mivel stabil magok szomszédos izobárjai általában nem stabilok. Végül megemlítjük, hogy míg a (p , gamma)-reakcióknál fontos szerepet játszik az interpretációban az izotróp-spin kiválasztási szabály (amely megtiltja az elektromos dipol-átmeneteket $T=0$ állapotok között), addig (n , gamma)-reakcióknál ez a szabály jelentőségét veszti, mivel stabil magok neutronokkal történő bomlásánál ritkán keletkeznek $T=0$ jellegű végmagok.

A termikus neutronok által kiváltott (n , gamma)-reakciók kísérleti vizsgálata világviszonylatban rohamosan szélesedik: egyre több laboratóriumban képezi a vizsgálatok tárgyát; az (n , gamma)-reakciókkal foglalkozó kutatócsoportok száma ma mintegy 30-ra tehető. Hazánkban, a Központi Fizikai Kutató Intézetben is folynak ilyen jellegű vizsgálatok, amelyekről — tekintve e cikk összefoglaló jellegét — nem kívánunk részleteiben beszámolni; a magyar csoport eredményeire az egyes témák irodalmi hivatkozásaiban utalunk.

A következőkben az (n , gamma)-reakciók problémaköréről adunk egy általános jellegű összefoglalást, áttekintést. E közben a termikus, illetve epetermikus neutronok befogására és a reakció gamma spektroszkópiai oldalról való tanulmányozására korlátozzuk magunkat.

II.

A gamma-energiaspektrum tanulmányozása

1. Neutronforrás*

Termikus neutronokkal kiváltott (n , gamma)-reakciók esetén a neutron-forrás általában termikus reaktor. A targetanyag elhelyezése többféleképpen történhet:

a) A targetanyagot egy horizontális csatornának közvetlenül az aktív zóna melletti részén helyezzük el. A nagy neutronfluxus következtében a gamma intenzitás nagy, különösen ha — mint az szokásos — kg nagyságrendű mennyiségben helyezzük el a targetet. A keletkezett gamma-sugárzás a horizontális csatornán át jól kollimáltan jut el a mérőberendezésre. A mérőberendezés ilyen megoldásnál „látja” az aktív zónát és így regisztrálja a hasadásnál keletkező nagy intenzitású gamma-sugárzást is, ami nagy háttérrel jelent és lehetetlenné teszi a méréseket. Ezért az aktív zóna és a target közé egy 10—20 cm hosszúságú bizmuttömböt szokás elhelyezni, ami nagyságrendekkel csökkenti a háttér gamma-sugárzást és a gyors neutron-fluxust. Ugyanakkor természetesen csökken a termikus neutron-fluxus is, azonban a Bi termikus neutronokra vonatkozó kis hatáskeresztmetszete következtében sokkal kisebb mértékben. A targetanyagot grafit-, berillium- vagy alumínium-tokban szokás elhelyezni (az ezektől származó háttér ugyanis a neutronokra vonatkozó hatáskeresztmetszet kis értéke miatt kicsi); a tokot általában hűteni kell.

b) Újabbán a targetanyagot a reaktor valamelyik úgynevezett tangenciális csatornájában helyezik el. A tangenciális csatorna közvetlenül az aktív zóna mellett megy el, de nem „látja” az aktív zónát. Ennek megfelelően az aktív zónából származó gamma háttér jelentősen csökken. A háttér további csökkenése érhető el egy néhány cm-es bizmut rétegnek az aktív zóna és a tangenciális csatorna közé való helyezésével.

c) Fel lehet használni besugárzásra a termikus oszlopot is; ilyenkor a gyors-neutronok zavaró hatása minimálisra csökken.

d) Az előző három megoldás közös vonása, hogy a targetanyagot az aktív zóna közelében helyezzük el és a keletkezett gamma-sugárzás a megfelelő csatornán át jut el a mérőberendezésbe. Ez az ún. belső target elhelyezés azonban nem mindig alkalmazható: ilyen eset pl. ha dúsított izotópon kívánunk méréseket végezni, amelyből csak kis mennyiség áll rendelkezésünkre, vagy ha pl. koincidencia vizsgálatokat végzünk. Ezekben az esetekben a targetet a reaktorfalon kívül, a reaktorcsarnokban helyezzük el (külső target elhelyezés). A neutronnyaláb horizontális vagy tangenciális csatornán át jut el a targetre. Természetesen külső target elhelyezésnél a neutron-fluxus rendelkezésre álló értéke nagyságrendekkel kisebb mint belső target elhelyezés mellett. Mivel a csatorna átmérője általában jóval nagyobb a target átmérőjénél, ezért bórosparafinból és ólomból álló, alkalmasan tervezett kollimátorrendszer segítségével célszerű leszűkíteni a neutronnyalábot. A neutronnyaláb kollimáltsága ill. az intenzitás a kollimátorok belső nyílásának kúpos kiképzésével növelhető. A külső target elhelyezésre példaként hivatkozunk a 14. ábrára.

* Bizonyos részletkérdések megtalálhatók Gyemidov munkájában [De63].

A legtöbb vizsgálatnál nagy fontossággal bír a nyaláb tisztasága, azaz a háttérrel jelentő gyorsneutronoktól és gammasugárzástól való mentessége. Tiszta nyaláb előállítására (és következőképpen a háttér csökkentésére) az alábbi megoldások ismeretesek:

a) Legegyszerűbb megoldás, ha a csatorna belsejében az aktív zóna és a kollimátorok között egy kb. 20–30 cm hosszúságú bizmut dugót helyezünk el (l. pl. [KD61]). A bizmut nagy rendszáma következtében — mint már említettük a belső target elhelyezésnél — igen effektíven kiszórja a nyalábból az aktív zónából származó gammasugárzást; szórási hatáskeresztmetszete gyors neutronokra nagy, míg a termikus neutronokra jóval kisebb. Alkalmazása esetén éppen ezért a háttér gyors neutronfluxus és gammasugárzás 10^3 , illetve 10^5 nagyságrendű faktorral csökken, míg a termikus neutronfluxus csak mintegy 30-szor lesz kisebb.

b) Ha az előbb ismertetett módon egy bizmut egykristályból álló tömböt helyezünk el a csatornában, akkor a gammaháttér és gyors neutronháttér azonos mértékben csökken, mint a bizmut dugónál, azonban jóval kisebb lesz a termikus neutron fluxusban elszenvedett veszteség. Ez utóbbi megértése érdekében figyelembe kell vennünk, hogy a termikus neutronok a bizmuton való áthaladás közben nukleáris rugalmas szórás, a kristályrácsra elszenvedett koherens szórás és rugalmatlan fonon szórás következtében szóródhatnak ki a nyalábból. A koherens szórás okozta veszteség egykristály esetében jóval kisebb mint a polikristályos tömör bizmut dugónál, mivel egykristály esetében a Bragg-reflexió feltétele a termikus körüli Maxwell-eloszlásnak csak néhány izolált energiaértékére teljesül. Ennek megfelelően egy kb. 30 cm hosszúságú bizmut egykristály a termikus neutron, gyorsneutron és gamma-fluxust rendre kb. 10, 10^3 , illetve 10^5 nagyságrendű faktorral csökkenti [Po63]. (Szűrőként bizmut helyett használható kvarc is [Wh63b], azonban kisebb rendszáma miatt a gamma csökkentési tényezője kisebb.) A rugalmatlan fonon-szórás okozta intenzitás veszteség nagy mértékben csökkenthető, ha az egykristályt cseppfolyós nitrogén hőmérsékletén tartjuk, — ami természetesen bizonyos technikai nehézséget jelent. Hűtött egykristály alkalmazása esetén a termikus fluxus csak mintegy 30–50%-kal csökken.

A bizmut egykristály szűrő alkalmazásának előnye a nagy nyalábtisztaság és a viszonylag kismértékű termikus fluxus csökkenés; hátrányt jelentenek az a) pontbeli megoldással szemben a nagyobb technikai nehézségek (nagy méretű bizmut egykristály elkészítése nehéz feladat; csatornán belül kell hűteni).

c) Egy másik lehetőség a nyaláb tisztaságának növelésére, ha a horizontális csatornából kilépő jól kollimált neutronnyalábot egy megfelelő szög alatt álló ólom egykristályra ejtjük. A kristály és a neutronnyaláb által bezárt szög megfelelő megválasztásával elérhetjük, hogy a termikus neutronokra teljesüljön a Bragg-reflexió feltétele és így ezek a direktnyalábból kiszóródjanak és az oldalt elhelyezett targetra essenek. Ugyanakkor a gyorsneutronok és a gammasugarak gyakorlatilag irányváltozás nélkül haladnak át a kristályon. Ennél a megoldásnál a b)-hez hasonlóan nagytisztaságú, sőt monoenergetikus nyalábot állíthatunk elő, azonban az intenzitásviszonyok sokkal kedvezőtlenebbek: a reflektált nyalábban a termikus neutronfluxus értéke mindössze néhány százaléka az eredetinek [Ma59, Mo60a]. (Megjegyezzük, hogy termikus (n , gamma)-reakciók vizsgálata esetén nem jelent előnyt, ha a Maxwell-eloszlás helyett egy ebből kiválasztott monoenergetikus nyalábot használunk.)

d) Rossendorfban egy egészen más jellegű megoldást dolgoztak ki a neutron-

nyaláb tisztaságának növelése érdekében, felhasználva a lassú neutron spektroszkópia tapasztalatait [A161].

Ennél a megoldásnál a horizontális csatornából kilépő neutronnyaláb egy lassú neutronszelektorra esik, amely csak a termikus neutronokat engedi át, a gyorsneutronokat és a gammasugarakat kiszőrja. A szelektor lényegében véve egy 1 m hosszúságú, 12 cm átmérőjű, mintegy 8000/min. fordulatszámmal forgó acélhenger, amelynek a palástjában spirálisan 18 db 2 cm^2 keresztmetszetű horony helyezkedik el. Helyes méretezés mellett a spirálítás következtében a termikus neutronok kis sebességük miatt az elforduló résen való keresztülhaladás közben éppen szabad utat kapnak. Ezzel a módszerrel a gyorsneutron és a gamma háttér mintegy 10^4 nagyságrendű faktorial csökken, míg a termikus neutronfluxus az eredeti érték 40%-ára esik. A nyalábtisztaság tehát összemérhető az előző pontokban ismertetett módszerekkel elérhetővel, azonban az intenzitáviszonyok kedvezőbbek. Ugyanakkor a forgó mechanikus berendezés hosszú idejű üzemeltetése kétségtelenül bizonyos fokú hátrányt jelent.

Az a)–d) pontokban ismertetett megoldások mindegyikénél tovább növelhető a nyalábtisztaság, ha a primer neutronnyaláb tangenciális csatornából származik.

A külső target elhelyezésnél a targetet elhagyó neutronnyalábot üreges belső kiképzésű ún. csapdára szokás ejteni, amelyben elnyelődik és így a környezetben a háttér a dozimetriailag és mérés technikailag megengedhető szint alá csökken. A csapdát célszerű a targettől néhány méter távolságban elhelyezni, hogy az esetleges neutron visszaszóródás ne okozzon háttérnövekedést.

Megjegyezzük, hogy az e pontban elmondottak általában érvényesek a termikus (n, gamma)-reakciók vizsgálatánál használatos mérési elrendezéseknél; érvényességük nem korlátozódik az energiaspektrum mérésére.

2. Gamma-spektrométerek

Az (n, gamma)-reakciók vizsgálatának a leghosszabb történelmi múltra visszatekintő és a legfejlettebb iránya a termikus neutronbefogást követő gammasugárzás spektrumának tanulmányozása. Ez jórészt a belső target elhelyezésnél fellépő nagy neutronfluxus következtében kialakuló kedvező intenzitáviszonyok eredménye. A gamma-intenzitás nagyságrendjének szemléltetése céljából megemlítjük, hogy belső target elhelyezésnél, tipikus kísérleti körülmények között a horizontális csatorna kilépő nyílásánál 10^5 – 10^8 gamma/cm² sec intenzitás érhető el, ami 10^{-2} – 10^{-5} C-nek felel meg. Ez az intenzitás jóval meghaladja a radioaktív bomlásnál vagy a töltött részek által kiváltott magreakcióknál fellépő intenzitást, éppen ezért felhasználhatók olyan jó felbontású, de kis effektivitású spektrométerek is, amelyek az említett területeken nem jöhetnek számításba.

Az (n, gamma)-reakciók vizsgálatánál a gamma-spektroszkópiának csaknem a teljes arzenálját felhasználjuk. Az alábbiakban ismertetjük a főbb spektrométer típusokat és felhasználhatósági területeiket; nem foglalkozunk azonban a különböző spektrométerek konstrukciójával és részletes ismertetésével, — e vonatkozásban az összefoglaló munkákra (pl. [Ba60c, De63], stb.), továbbá a részletes irodalomra utalunk.

a) A különböző spektrométerek összehasonlítása.

A gyakorlatban használt spektrométerek a következők:

1. Mágneses párspektrométer, amely a gammasugarak energiáját az általuk egy alkalmas konverterben kiváltott elektron-pozitronpár energiájának megmérése alapján határozza meg [Wa48, Ki53, Ba60a, Ba60b].

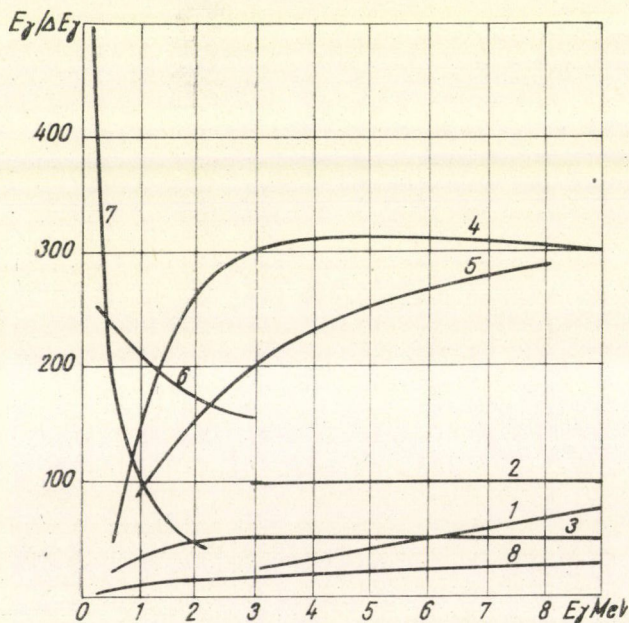
2. Mágneses Compton-spektrométer: a gammasugárzás által alkalmas konverterben kiváltott Compton-elektron energiáját határozza meg a mágneses tér változtatásával [Gr55, Gr60, Mo60a, Mo60b].

3. Diffrakciós kristály-spektrométer, amelynél a gammasugarak megfelelő kristályon bekövetkezett Bragg-reflexiója képezi az energiamérés alapját. Két típusa használatos: az egyik két síkkristályból áll [Kn59a, Kn59b], a másik egy görbült kristályból [Ro57, Ka60, Je60, Sch60, Szu62].

4. Szcintillációs NaJ(Tl)-spektrométer. (pl.: [KD61]).

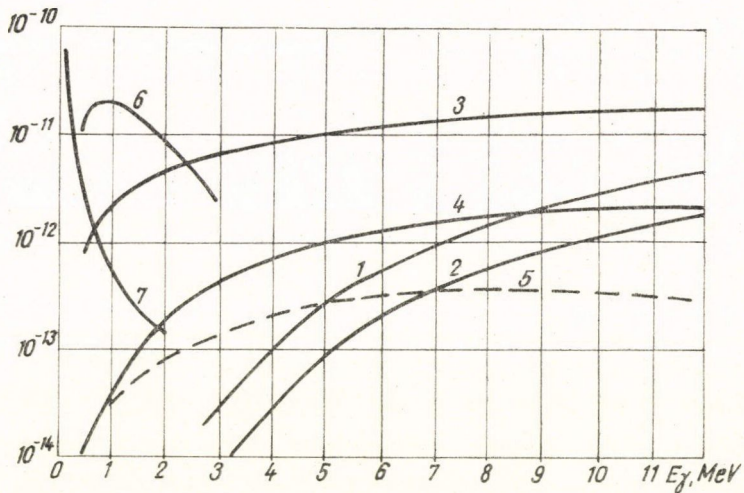
5. Félvezető gamma-spektrométer [Ta63, Ew64, Wa64].

Anélkül, hogy az egyes spektrométerek részleteibe bocsátkoznánk, az 1. és 2. ábrán összehasonlításuk megadjuk a különböző spektrométerek két jellemző adatának, az energia felbontóképességnek és a hatásfoknak az energiafüggését. A valóságban mind a jó felbontóképességnek, mind a nagy hatásfoknak egyidejűleg nagy jelentősége van, éppen ezért a spektrométer használhatóságára, jószágára sokkal jellemzőbb az az érték, amely megmondja, hogy milyen legkisebb intenzitású

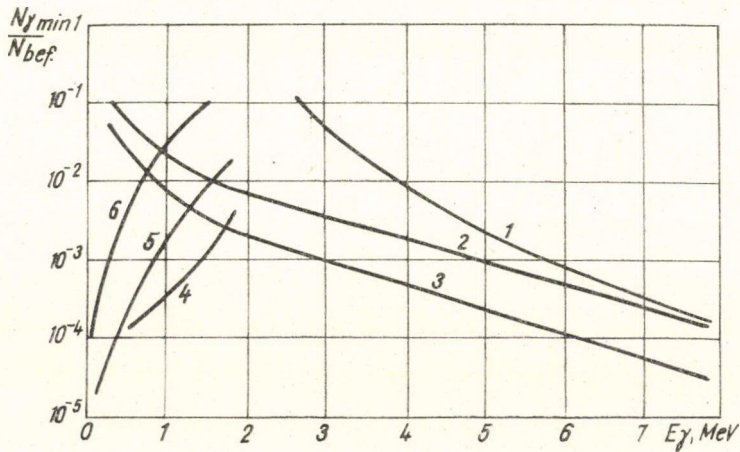


1. ábra. Különböző gamma-spektrométerek energiafelbontóképességének összehasonlítása. 1 — mágneses párspektrométer [Ki53]; 2 — mágneses párspektrométer speciálisan görbült résekkel a számlálók előtt [Ba60b]; 3 — mágneses Compton-spektrométer [Gr55]; 4 — mágneses Compton-spektrométer [Gr60]; 5 — Mágneses Compton-spektrométer, amely felhasználja a szórt gamma-kvantumok és az elektronok koincidenciáit [Mo60]; 6 — két síkkristályt tartalmazó diffrakciós spektrométer [Kn59b]; 7 — görbült kristályú diffrakciós spektrométer [Ro57, Ka60, Sch60]; 8 — szcintillációs spektrométer

gamma-vonalat lehet még a spektrumból különválasztani, — ez a jellemző természet-szerűleg magában foglalja mind a felbontást, mind a hatásfokot. Ezek az értékek láthatók a 3. ábrán.



2. ábra. Különböző gamma-spektrométerek hatásfokának összehasonlítása. 1—6 ugyanaz, mint az 1. ábrán; 7 — diffrakciós spektrométer Cochois-geometriában [Szu62]. Az ordinátára az effektivitás van felvéve, amelynek mértékéül a gammaforrás egy fotonjára eső beütésszámot vettük, a kérdéses csúcsban



3. ábra. Különböző gamma-spektrométerek „jóságának” összehasonlítása. Az ordinátán az a legkisebb gamma-vonalintenzitás van felmérve, amit még adott energiánál ki lehet választani a spektrumból, ha nagy befogási hatáskeresztmetszetű targetet használunk. 1 — mágneses párspektrométer [Ba60b]; 2 — mágneses Compton-spektrométer [Gr55]; 3 — mágneses Compton-spektrométer [Gr60]; 4 — két síkkristályt tartalmazó diffrakciós spektrométer [Kn59b]; 5 és 6 — görbült kristályú diffrakciós spektrométerek DuMond [Ro57] és Cochois [Szu62] geometriában

A különböző spektrométerek összehasonlítását még szemléletesebbé tehetjük, ha egy konkrét esetben példaként megmutatjuk az ugyanazon (n , gamma)-reakcióból származó gammasugárzásnak különböző spektrométerekkel felvett spektrumát. A 4. ábrán látható a $Gd^{157}(n, \text{gamma})Gd^{158}$ reakcióból származó gammasugárzás spektruma:

1. mágneses párspektrométerrel [Kn60],
2. 2%-os felbontású mágneses Compton-spektrométerrel [Gr58],
3. 0,3%-os mágneses Compton-spektrométerrel [Gr62],
4. két síkkristályból álló diffrakciós spektrométerrel [Kn60] mérve.

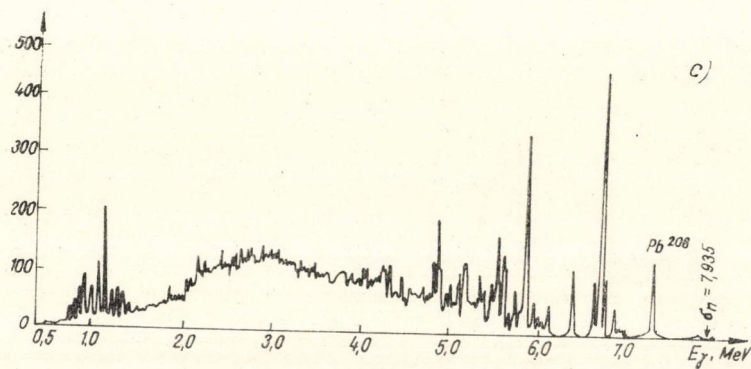
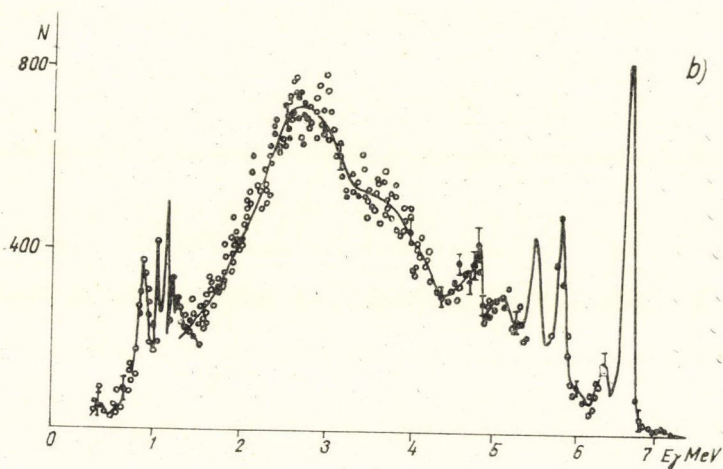
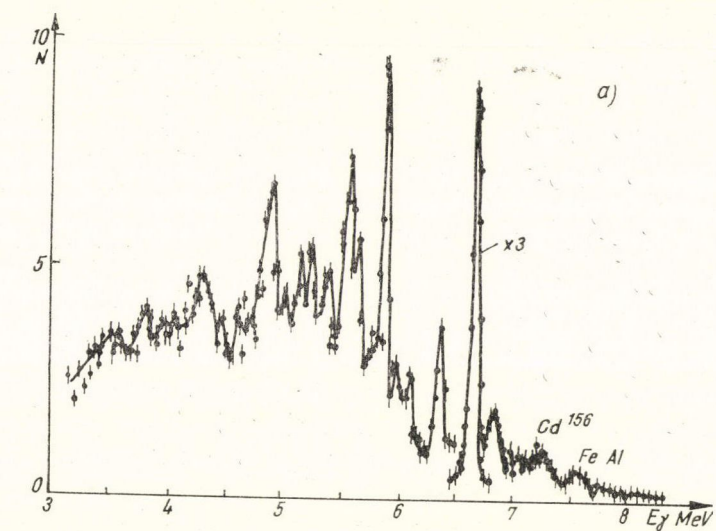
Az 1—4. ábrák segítségével minden egyes konkrét esetben kiválaszthatjuk az adott energiaintervallumnak és intenzitásviszonyoknak legjobban megfelelő spektrométert. Általánosságban azt mondhatjuk, hogy a kisenergiájú intervallumban (2 MeV alatt) elsősorban kristály spektrométerek használhatók, míg a nagyenergiájú intervallumban a párspektrométer. Majdnem az egész energiaintervallumban jól használható a mágneses Compton-spektrométer.

b) Szcintillációs spektrométerek.

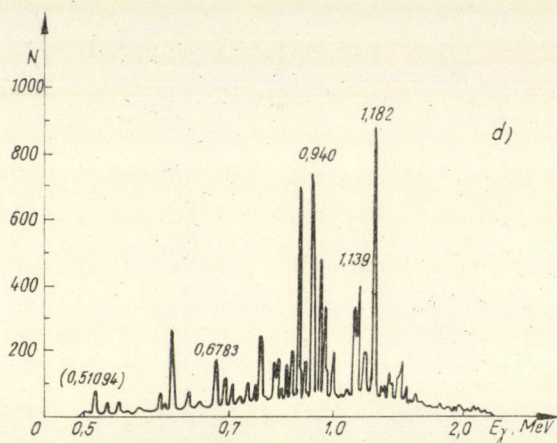
Külön kell szólnunk a szcintillációs spektrométerekről, amelyeknek a felbontása közismerten — és az ábrákból is láthatóan — sokkal rosszabb a többinél. Ezen túlmenően a szcintillációs módszerrel felvett gammaspektrumok a Compton-szórás és a párképzés miatt rendkívül bonyolultak, komplexek, amelyekben egy adott energiájú gammaátmenet kikeresése és méginkább intenzitásának meghatározása nagyon nehéz, sőt sok esetben lehetetlen feladat.* Ennek ellenére a szcintillációs spektrométerek mégis felhasználást nyernek az (n , gamma)-reakciók vizsgálatánál, aminek oka nagy hatásfokukban keresendő. Például koincidenencia-vizsgálatok jelenleg csak szcintillációs spektrométerrel lehetségesek intenzitás okokból. A rezonanciatartományban — ahol a neutronok intenzitása a termikus neutronokhoz képest nagyon kicsi — egyelőre szintén csak a szcintillációs módszer a járható út. Ezekben az esetekben, amikor a szcintillációs számlálók használata elkerülhetetlen, különböző megoldásokat alkalmaznak, amelyek megszabadítanak e számlálók leghátrányosabb tulajdonságától, a spektrum bonyolult voltától. A spektrum úgy tehető egyszerűbbé, ha a gammasugárzásnak a NaJ kristályban lehetséges kölcsönhatásai közül egy kivételével a többi kizárjuk. Annak megfelelően, hogy melyik kölcsönhatást hagyjuk meg, a következő spektrométer típusok használhatók:

1. Compton-spektrométer [Be55, Br56], amely két egymással $130\text{--}160^\circ$ szöget bezáró szcintillációs kristályt tartalmaz. Az első kristály — megfelelő koincidenciaberendezés segítségével — csak azokat a benne Compton-szórást szenvedett gammákat regisztrálja, amelyek szóródás után a másik kristályra estek. Mivel a szórási szöget rögzítettük, minden egyes gammaenergiának a spektrumban egy meghatározott csúcs fog megfelelni. Újabbban módosították ezt a megoldást [T60], a két kristály jeleit elektronikusan összegezik, minek következtében a szög rögzítésére nincsen szükség, ezért a második kristályt tetszőleges nagy méretűre választhatjuk.

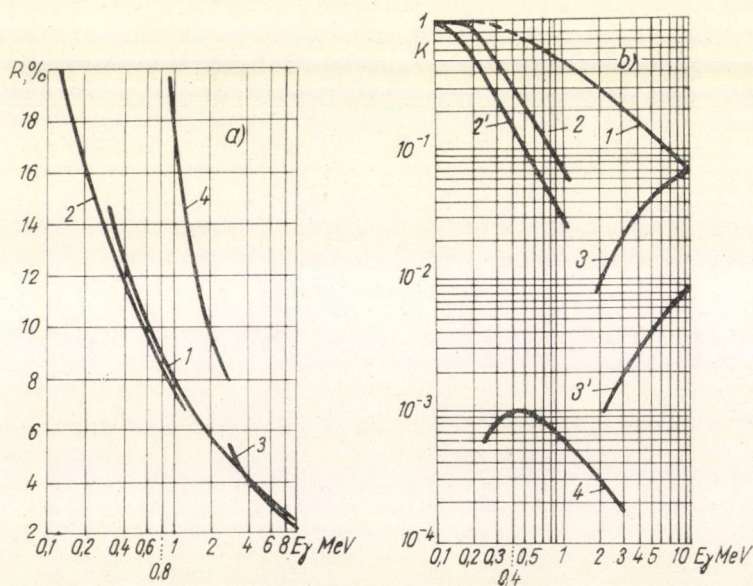
* Meg kell még említenünk — mint technikai nehézséget — a szcintillációs detektorok tápfeszültségének stabilizálásával szemben fennálló szigorú követelményeket. E követelmények kielégítése mellett még speciális stabilizáló rendszereket is kidolgoztak a detektorból, erősítőből és nagyfeszültségű tápegységből álló rendszer eredő stabilitásának növelésére (pl. [Wa55, K60, Ri61, B164, Sz65]).



4abc. ábra



4. ábra. A Gd^{157} (n , gamma) Gd^{158} gammaspektruma. *a* — mágneses párspektrométerrel [Kn60], *b* — 2%-os felbontású mágneses Compton-spektrométerrel [Gr58], — *c* — 0,3%-os mágneses Compton-spektrométerrel [Gr62], — *d* — két síkkristályt tartalmazó diffrakciós spektrométerrel [Kn60] mérve. Felhívjuk a figyelmet, hogy az egyes ábrák energiaskálája különböző és tükrözi a különböző spektrométerek használhatóságának energiafüggését



5. ábra. Különböző speciális szcintillációs spektrométerek felbontóképességének (a) és effektívitasának (b, a teljes elnyelődésnek megfelelő csúcs alapján) összehasonlítása. 1 — totális abszorpciós spektrométer [Bo61]; 2 — egykristályos spektrométer (30×20 mm) [Ka58]; 3 — párspektrométer [Tr61]; 4 — Compton-spektrométer [Br56]

2. Három kristályból álló szcintillációs párspektrométer [Se59, Tr61, As61, Fi62, B63]. A középső kristályra eső gammakvantum által kiváltott események közül — megfelelő koincidenciaberendezés segítségével — csak azokat regisztráljuk, amelyek a középső kristályban párképződést szenvedtek és a párképződéskor keletkezett két 0,5 MeV-es annihilációs gammakvantum mindegyike kölcsönhatás nélkül kijutott a centrális kristályból és megszólaltatta az oldalsó detektorokat. Ennek megfelelően minden egyes gammaenergiának az egykristályos szcintillációs spektrométertől eltérően nem három, hanem egy csúcs felel meg.

3. Egy harmadik lehetőség az ún. totális abszorpció, vagy anti-Compton spektrométer [B56, A53, Tr59, E60, P60, Bo61, Mn64, M65]. Ennél a centrális kristályt egy nagyméretű szcintillációs kristály veszi körül, amely antikoincidenzába van kapcsolva a centrális kristállyal. Ennek következtében csak olyan események regisztrálódnak, amelyeknél a gammakvantum teljes energiáját elvesztette a középső kristályban való kölcsönhatás során.

4. Hoogenboom-féle összegező spektrométer, amelyről — mivel elsősorban koincidencia vizsgálatokra alkalmas — a III. fejezetben lesz szó.

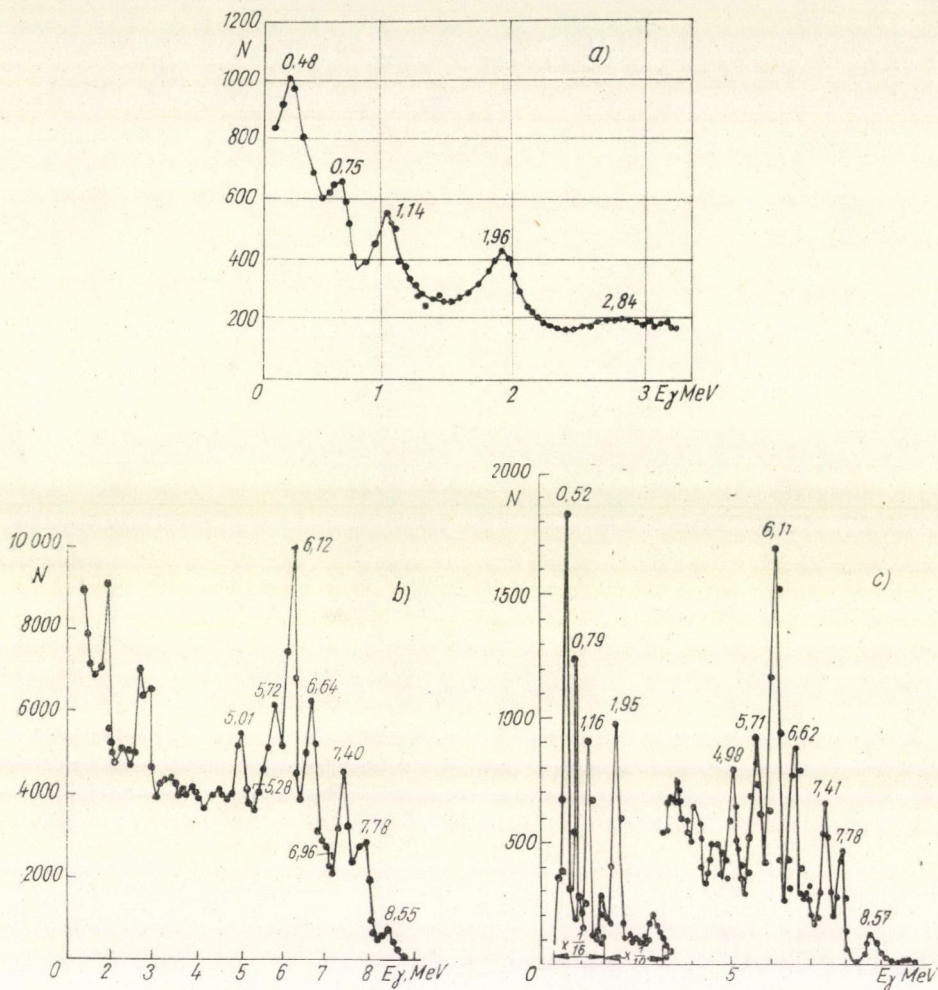
A különböző speciális szcintillációs spektrométerek felbontóképességének és hatásfokának összehasonlítása látható az 5. ábrán. Ugyancsak e spektrométerek összehasonlítását szolgálja a 6. ábra, amelyen a $\text{Cl}^{35}(n, \text{gamma})\text{Cl}^{36}$ reakcióból származó gammasugárzás energiaspektrumát láthatjuk Compton-, pár- és totális abszorpció szcintillációs spektrométerrel mérve.

c) Félvezető spektrométerek.

Az előzőekben ismertetett gamma-spektrométer típusok a gamma-spektroszkópia ma már klasszikusnak mondható fegyvertárába tartoznak. Újabban rendkívüli érdeklődéssel tekintenek a félvezető gamma-detektorok felé. Az utóbbi 6—7 évben sikeresen alkalmazták a Si-félvezető detektorokat nehéz töltött részek spektroszkópiájára. A közelmúltban sikereket értek el e detektorok méretének növelésében és a lítium driftelési eljárás alkalmazásában és sikerült elektronok spektroszkópiájára is alkalmassá tenni a Si-félvezető detektorokat. A következő lépés nyilvánvalóan a detektorok további tökéletesítése és gamma-spektroszkópiára való alkalmassá tétele. A gammasugarakra vonatkozó hatásfok növelése érdekében Si helyett Ge-t kell alkalmazni, mivel a fotoeffektus hatáskeresztmetszete Z^5 -tel arányos és így mintegy 40-szer nagyobb Ge mint Si esetében.

A legutóbbi időkben sikereket értek el nagyméretű Ge-félvezető detektorok előállításában [Ta63, Ew64]. E detektorok alkalmazása a gamma-spektroszkópiában nagy előnnyel kecsegtet: felbontásuk mintegy egy nagyságrenddel jobb mint a szcintillációs spektrométereknél és a 2 MeV feletti tartományban összemérhető a mágneses spektrométerek felbontásával (2 MeV alatt a felbontás elmarad a diffrakciós kristály-spektrométereké mögött). A jó felbontással egyidejűleg a hatásfok (intrinsic) 0,1—1% körüli, azaz kisebb mint a szcintillációs számlálóké, de jóval felülmúlja a mágneses spektrométerekét. A párosult jó felbontás és hatásfok lehetővé teszi új vonalak észlelését és többlettől való elválasztását. A félvezető spektrométer jóval egyszerűbb és könnyebben kezelhető, mint pl. a mágneses vagy diffrakciós kristály-spektrométer. A szcintillációs számlálóval összehasonlítva hátrányt jelent, hogy állandó jelleggel vákuumban, cseppfolyós nitrogén hőmérsékleten kell tartani.

A félvezető detektoroknál is megmarad a gammasugarak többféle lehetséges kölcsönhatása miatt a spektrum bonyolultságának problémája, bár a jobb felbontó-



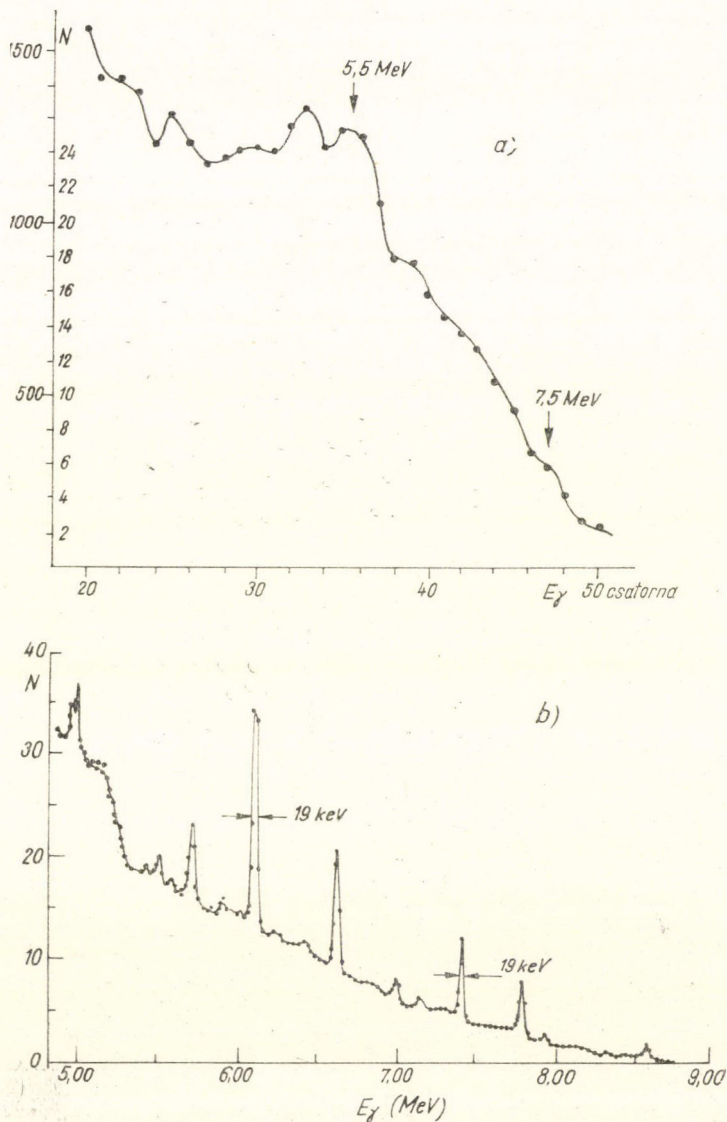
6. ábra. A Cl^{35} (n, gamma) Cl^{36} reakcióból származó gamma-sugárzás energiaspektruma.
 a — Compton-, b — pár-, c — totális abszorpciós szcintillációs spektrométerrel mérve.
 (Az energiaskálák különbözők!)

képesség miatt a fotocsúcsok élesen elválnak az egyéb kölcsönhatásnak megfelelő háttértől. Újabban sikerült olyan párdetektort konstruálni, amelynél a centrális detektor szerepét egy félvezető spektrométer tölti be, az oldalkristályok pedig szcintillációs detektorok [Ew64]. Ilyen párspektrométer már működik, azonban érthető módon az effektivitása nagyon kicsi.

Ge félvezető detektort (n, gamma)-spektrumok vizsgálatára először Wasson és munkatársai [Wa64] használtak. A detektor felbontása több mint egy nagyságrenddel jobb, hatásfoka pedig kb. két nagyságrenddel kisebb, mint a szokásos szcintillációs számlálóké. Illusztrációként a 7. ábrán bemutatjuk a Cl^{35} (n, gamma) Cl^{36}

reakcióból származó gamma-sugárzás szcintillációs számlálóval és Wasson félvezető gamma-detektorával mért energiaspektrumát.

Az elmúlt egy-két évben a Ge félvezető detektorok előállításának technikája igen nagy fejlődésen ment át és egyre nagyobb méretű detektorok előállítása vált lehetségessé. (Jelenleg pl. Canadában *Bartholomew* egy 26 cm^3 coaxiális Ge(Li)-



7. ábra. A $\text{Cl}^{35}(n, \gamma)\text{Cl}^{36}$ reakcióból származó gamma-sugárzás energiaspektruma a) szcintillációs számlálóval [Lo62] és b) félvezető gamma-detektorral [Wa64] mérve

detektorral rendelkezik). Az (n , gamma)-reakciókkal foglalkozó csoportok döntő többsége ma már felhasználja valamilyen formában a félvezető detektorokat [Ant65]. A közeljövőben feltehetően a félvezető gamma detektorok (n , gamma)-reakciók vizsgálatára való felhasználása ugrásszerűen meg fog nőni.

3. Fizikai következtetések a mért gamma-spektrumokból

Az előző pontban ismertetett spektrométerekkel kb. 1950 óta rendszeresen folynak gamma-energiaskoppek mérésék (n , gamma)-reakcióknál az egész periódus rendszerben és e szisztematikus mérések eredményei atlaszokba foglalva megtalálhatók [Gr58a, Ba58]. Az atlaszok összeállítása óta folyó további vizsgálatok lényegében véve kiegészítő jellegűek, illetve az eddigi mért spektrumok további finomítását célozzák.

Természetesen minden egyes konkrét mag esetében az illető magra jellemző, individuális sajátágokban bővelkedő spektrumot kapunk. Ettől eltekintve a spektrumok összességére bizonyos általános megállapításokat tehetünk. (E vonatkozásban részletesebb információ található az irodalomban pl. [Ba60b].)

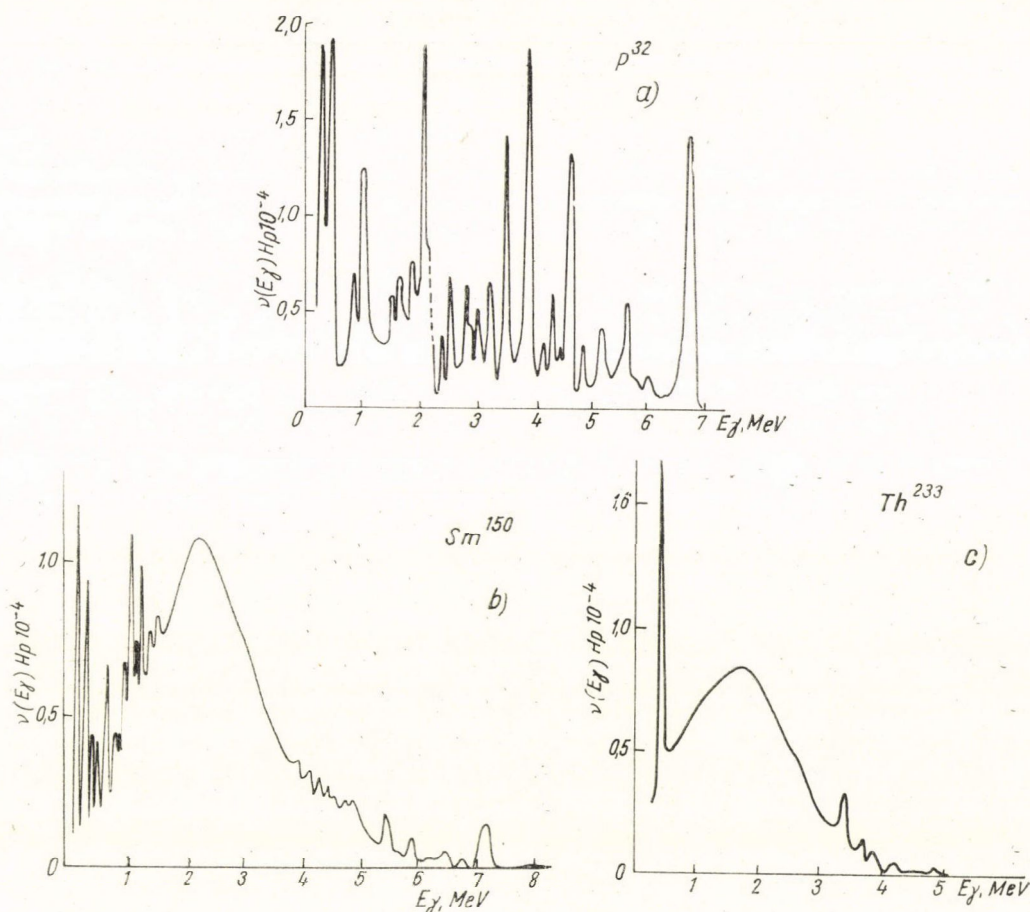
A tömegszám növekedésével a spektrumok általában egyre bonyolultabbak, komplexebbek lesznek. Ez érthető, hiszen a tömegszám növekedésével egyre nő a kötési energia környékén és alatta a nívósűrűség. A modern spektrométerekkel kb. a Cl-ig illetve K-ig praktikusán minden vonal felbontható. A 60—80 feletti tömegszám tartományban a spektrum általában folytonos, nem felbontható a mai mérés technikával, csak az elején és a végén jelennek meg különálló vonalak, amik a befogási állapotról az alapállapotra vagy valamelyik alacsonyán fekvő gerjesztett nívóra vezető gamma-átmenetnek, illetve az alacsonyán fekvő gerjesztett nívókról az alapállapotba történő átmeneteknek felelnek meg. A viszonyok szemléltetése végett három tipikus spektrumot mutatunk be, különböző tömegszám tartományban a 8. ábrán, amelyeket 2%-os felbontású mágneses Compton-spektrométerrel mértek. Látható, hogy a nagyobb tömegszámok felé haladva a spektrum egyre bonyolultabb, egyre kevésbé felbontható lesz.

A spektrum súlypontja a tömegszám növekedésével egyre inkább eltolódik a kisebb energiák felé. A Ta¹⁸² és Pb²⁰⁸ magok környékén a spektrum egyszerűbb lesz, ami annak a következménye, hogy a mágikus számok közelében a nívósűrűség csökken.

Egy másik általános megállapítás, hogy a páratlan számú neutron és páratlan számú proton tartamazó végmagok esetében a spektrum sokkal komplexebb mint a környező páros-páros illetve páros-páratlan magokra vezető reakciónál. Ez fizikailag érthető, mivel ha a protonok vagy neutronok száma páros, akkor a pár-energia fellépése következtében az alapállapothoz közel a nívósűrűség kisebb lesz.

Ha vizsgáljuk a különböző multipolaritású gammaátmenetek intenzitásának viszonyát, akkor nagy általánosságban a héjmodell által megkívánt viszonyokat kapjuk. Ugyancsak a héjmodell felfogását támasztja alá Grosev és munkatársai azon megfigyelése, hogy az azonos számú neutron tartamazó magok spektruma sok hasonlóságot mutat.

A 150 és 180 közötti tömegszám tartományban sok magnál a spektrum elején kb. 1 MeV körül nagy intenzitású különálló vonalak jelennek meg. Ez valószínűleg a páros-páros végmagok rotációs nívói közötti átmeneteknek felel meg.



8. ábra. 2%-os felbontású mágneses Compton-spektrométerrel mért spektrumok különböző tömegszám tartományban.

- a — $P^{31}(n, \text{gamma})P^{32}$,
 b — $\text{Sm}^{149}(n, \text{gamma})\text{Sm}^{150}$,
 c — $\text{Th}^{232}(n, \text{gamma})\text{Th}^{233}$

Nem nagyon könnyű magok esetében ($A > 70$) a befogási spektrum eléggé bonyolult ahhoz, hogy a kialakuló gamma-kaskádokat statisztikus folyamatként kezelhessük. E magok esetében tehetünk bizonyos általános statisztikus érvényességű kijelentéseket pl. a spektrum általános alakjára, a multiplicításra és a befogási állapot teljes radiációs szélességére. Az alábbiakban a spektrum általános alakjának statisztikus leírásával foglalkozunk.

Kiindulásul tételezzük fel (mint az az (n, gamma) -reakciók tárgyalásánál teljesen általános szokás), hogy az átmenetek általában E1 jellegűek, hiszen ezeknek a legnagyobb a valószínűségük és az (n, gamma) -reakcióknál fennálló gerjesztési viszonyok mellett a befogási nívó alatt elhelyezkedő sok nívó között általában akad

olyan, amelyekre El átmenet lehetséges. Ebben az esetben — mint ismeretes — az átmeneti valószínűség, w a γ -energia (E_γ) harmadik hatványával arányos. Könnyen belátható módon w függ még azon energiatartománynak a nívósűrűségétől (ϱ), ahova az átmenet vezet:

$$w(E, E_\gamma) = cE_\gamma^3 \varrho(E - E_\gamma). \quad (1)$$

E — a gerjesztési energia. Ebben a kifejezésben feltételeztük, hogy az átmeneti mátrixelemek függetlenek mind az energiától, mind a nívószerkezettől.

A továbbiakban figyelembe kell vennünk, hogy a gammaátmenetek általában nem vezetnek az alapállapotra, hanem gammakaszkádk alakul ki. Ha most meg akarjuk határozni a kaszkádok figyelembevételével a spektrális eloszlást, akkor a következő kifejezést írhatjuk fel:

$$\nu(E_\gamma) = \int_{E_\gamma}^{E_b} w(E', E_\gamma) Z(E') dE'.$$

Itt $\nu(E_\gamma)$ az E_γ körüli intervallumba eső γ -kvantumok száma, E_b a befogási energia, $Z(E')$ pedig annak a valószínűsége, hogy a mag az átmenetek során E' energiájú gerjesztett állapotba jut. $Z(E')$ az alábbi integrálegyenlettel adható meg:

$$Z(E') = \int_{E'}^{E_b} w(E, E - E') Z(E) dE + \delta(E' - E_b).$$

Ha felhasználjuk a Fermi-gázmodellből levezethető nívósűrűség formulát

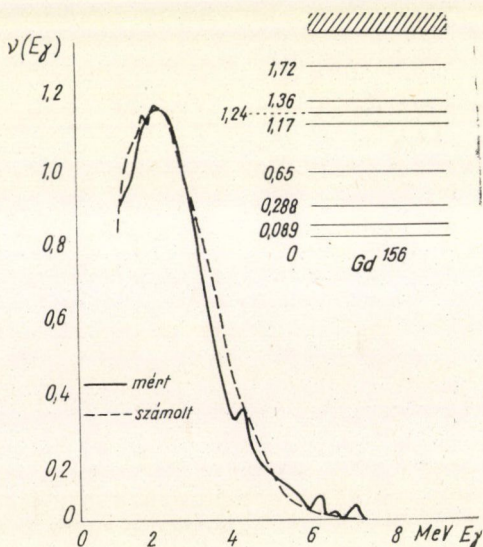
$$\varrho(E) = \varrho_0 \exp(2\sqrt{aE}), \quad (2)$$

akkor kiszámolhatjuk az (n , gamma)-reakciók során várható gammaspektrumot. Ezt illesztve a mért spektrumhoz, meghatározhatjuk az a paraméter értékét. A mért spektrum felbontatlan része ily módon kapcsolatba hozható a kérdéses mag nívósűrűségének energiafüggésével.

Példaként a 9. ábrán láthatjuk a $Gd^{155}(n, \text{gamma})Gd^{156}$ reakciónál kísérletileg kapott és elméletileg számolt spektrumot [Tro61].

Az elméleti számolás elektronikus számológéppel történt. Hasonló számításokat más magok esetében is végeztek és azt tapasztalták, hogy az elméleti számolás sok esetben helyesen visszaadja a spektrum alakját, de sok esetben a számolt spektrum eltér a mérttől. Az eltérés magyarázata kapcsolatos a reakció mechanizmussal. (Lásd IX.)

Végeredményben a mérések során kapott energiaértékek arra szolgálnak, hogy



9. ábra. A $Gd^{155}(n, \text{gamma})Gd^{156}$ reakcióból származó mért és számolt gammaspektrum [Tro61]

segítségükkel felépítsük az (n , gamma)-reakció során keletkezett mag nívósémáját. A nívóséma felépítésénél figyelembe kell vennünk, hogy a gammasugarak energiája az emisszió pillanatában bekövetkező visszalökődés miatt nem egyezik meg a tényleges gerjesztési energiával. A mért energiákat tehát korrigálnunk kell a visszalökődésre. Az E visszalökődési energia:

$$E = \frac{E_\gamma^2}{2M_{A+1}c^2},$$

ahol E_γ — az emittált gammakvantum energiája, M_{A+1} a keletkezett mag tömege, c — pedig a fény sebessége. Nagyenergiájú gammasugarak és könnyűmagok esetében a visszalökési energia néhány ezer eV-ot is elérhet.

A nívóséma felépítése a Ritz-kombinációs elv felhasználásával történhet. Ahhoz, hogy csupán a Ritz-elv alapján meghatározzuk a nívósémát, nagyságrendben $10^{-3}\%$ -os pontossággal kellene ismernünk a különböző gammaátmenetek energiáját. Mivel ez a pontosság ma még nem elérhető, különböző egyéb módszereket kell segítségül hívnunk. Így pl. iránymutató információkat kaphatunk a nívóséma felépítéséhez, ha koincidencia-vizsgálatokat végzünk a kaszkád különböző nagyintenzitású tagjai között. Kiegészítő információt nyújthatnak még a béta-bomlás, Coulomb-gerjesztés, (d, p)-reakciók vizsgálata, stb. A kombinált módszerek segítségével felépített nívósémák megtalálhatók az (n , gamma)-spektrumokat tartalmazó atlaszokban (l. II/3).

4. Belső konverziós elektronspektrum

A neutronbefogás után kialakult gerjesztett mag gerjesztési energiáját nemcsak gamma-emisszióval, hanem részben belső átalakulás útján, belső konverzióval is elvesztheti. Belső konverzió elsősorban nagyrendszámú magoknál és kisenergiájú, nagy multipolaritású átmenetekenél várható. Megmérve a konverziós elektronok energiaspektrumát és figyelembe véve az általában ismert kilépési munkát, ugyanúgy meghatározhatjuk az energianívókat mint a gamma-spektrum esetében —, feltéve, ha a konverziós együttható elegendő nagy. Ez különösen a spektrum kisenergiájú részében adhat hasznos kiegészítő információt a gamma-spektrumok méréséhez. Ezen túlmenően, összehasonlítva a gamma-spektrumot a belső konverziós elektronspektrummal, meg lehet határozni az átmenet jellegét (elektromos vagy mágneses) és multipolaritását.

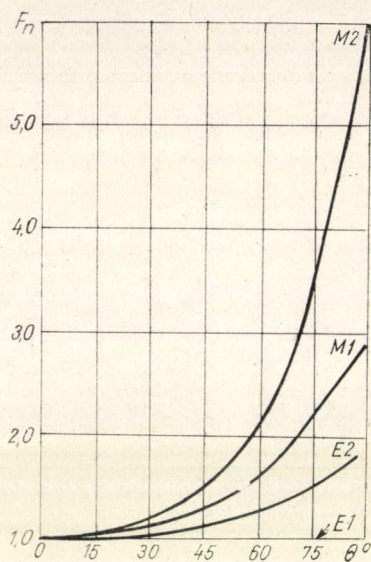
Belső konverziós elektronspektrum mérések történhetnek az aktív zónához közel elhelyezett tarrgettel, vagy a horizontális csatorna kimenetén elhelyezett külső tarrgettel. Az elsőre példa a müncheni csoport mérése [Me60], a külső tarrget elhelyezésre pedig egy szovjet csoport [Pe61] és a stockholmi fizikusok [Bä62] mérése. A belső konverziós elektronspektrum vizsgálatok intenzitás és háttér okokból a technikailag nehéz mérések közé tartoznak.

5. Belső párképzés

A neutronbefogásnál a gerjesztett magon belső párképzés is végbemehet. A 10. ábrán látható, hogy a keletkezett elektron-pozitron pár által bezárt szög erősen függ a multipolaritástól és az átmenet jellegétől [Ba60c], ezért ha megmérjük

10. ábra. Belső konverziós párok szögeloszlása különböző multipolaritású átmeneteknél. $F_n = R_n/R_{E1}$, ahol $R = \frac{W(\theta)}{W(0)}$, azaz a θ szög alatti szétrepülés valószínűségének a viszonya a 0° szög alatti kirepülés valószínűségéhez [Ba 60c]

az elektron-pozitron szögeloszlást, akkor meghatározhatjuk a kérdéses átmenet multipolaritását. A szögeloszlás meghatározása történhet speciális mágneses spektrométerrel, ahol megfelelő blendékkel különböző szögeket bezáró párokat választunk ki [Da 62, Ba 60c], vagy mágneses térbe helyezett Wilson-kamrával [Me 61]. Mindkét esetben a belső párképzési események kis száma miatt igen nagy technikai nehézségek lépnek fel, amit növel az, hogy a szögeloszlás meghatározásával egyidejűleg mérni kell a kérdéses átmenet energiáját is, mert különben nem lehet elválasztani a különböző gammaátmenetekből származó belső konverziós párokat.



III.

Koincidenca-vizsgálatok

Az (n , gamma)-reakciók tanulmányozásának egy másik irányát képezik a koincidenca-vizsgálatok, amelyeknél a neutronbefogás után kialakult gamma-kaskádok különböző tagjainak egymáshoz való viszonyát, összetartozását, stb. vizsgáljuk. Ezek a vizsgálatok kiegészítő információkat szolgáltatnak, amelyek az energiaspektrum ismeretében hozzásegítenek a nívóséma felépítésének tisztázásához.

1. Gamma-gamma koincideneciák

Koincidenca-vizsgálatok céljára jelenleg csak a szcintillációs spektrométerek jöhetnek számításba, mivel az egyéb spektrométerek hatásfokának kicsi volta ilyen vizsgálatokat nem tesz lehetővé*. A mérőberendezés rendszerint egy gyors-lassú koincidenciarendszer; a lehetőleg nanoszekundumos tartományba eső időbeli felbontóképességgel rendelkező gyorskoincidenca-egység a véletlen koincideneciák számát van hivatva csökkenteni. A leggyorsabb esetben a koincidenca-spektrométer 2 egykristályos szcintillációs detektort tartalmaz [Es 60, Es 61 a, Es 61 b]. Ismeretesebb azonban olyan mérések is, amelyeknél a koincideneciát kiválasztó csatorna egy szcintillációs párspektrométert tartalmaz, a kiválasztott vonallal koincideneciá-

* Koincidenca vizsgálatok céljára mind energia- mind időfelbontás szempontjából a félvezető detektorok előnyösebbek lennének mint a szcintillációsak (a felfutási idő 20–40 nsec, szemben a NaJ(Tl) szcintillációs gamma-detektorok 250 nsec-val). Ma azonban még nincs megoldva a félvezető detektorok koincidenca vizsgálatokban való felhasználása. Várható, hogy a jövőben e területen is sikerül előrehaladást elérni.

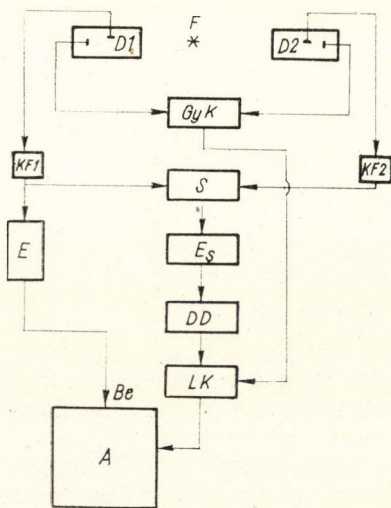
ban levő spektrum felvételére szolgáló csatorna pedig egy egykristályos szcintillációs detektorból áll [Ma 59, Se 59, Tr 61, Fi 62]. Ez utóbbi megoldásnál a spektrum nagyenergiájú részében meglehetősen tiszta kísérleti körülmények között tudunk energiát kiválasztani: a párspektrométer ugyanis — mint már említettük — a szcintillációs detektorokra jellemző bonyolult spektrumot leegyszerűsíti.

A koincidencia-spektroszkópia terén meg kell emlékeznünk Esztulin és munkatársai szisztematikus munkájáról. Egykristályos szcintillációs spektrométerükkel elsősorban a spektrum alacsonyenergiájú részének tanulmányozására specializálták magukat [Es 60, Es 61a]. Az e részben található csúcsok, illetve a nekik megfelelő átmenetek intenzitásának meghatározását nagyon megnehezíti a nagyobb energiájú gammasugarak Compton-szórásából származó „piedesztál”. Ennek figyelembe vétele úgy történhet, hogy két mérést végzünk: az egyiknél a spektrumot felvevő detektor elé 2 mm-es ólomszűrőt helyezünk, amely a lágy gamma-sugárzást erősen abszorbeálja, ugyanakkor a kemény komponens intenzitását alig csökkenti; a másik mérésnél az ólomabszorbenst eltávolítjuk a detektor elől. A mért két spektrum különbsége lényegében véve megadja a lágy komponens piedesztál nélkül. (A különbségben megmarad azonban a reaktorból származó gammaháttér kis-energiájú része.)

Esztulinék munkájának egy másik iránya a gammaspektrumok kisenergiájú részében jelentkező röntgen-csúcs vizsgálata. A gammaátmenetek belső konverziója során és részben a targetben abszorbeálódott gammakvantumok fotoeffektusánál a gammasugarat kibocsátó mag K elektronhéjából kilép egy elektron és a keletkezett lyuk betöltése során röntgen-sugárzás lép fel. Szerencsés körülmények között — ha a koincidencia-spektrum nagyon egyszerű — össze lehet hasonlítani egy konkrét gammaátmenet foto-csúcsának és X -csúcsának intenzitását, amiből meghatározható a K belső konverziós koeficiens. Ennek mért értékét a különböző multipolaritások feltételezésével számolt elméleti értékkel összevetve dönthetünk a kérdéses átmenet multipolaritásáról [Es 61 b].

Az utóbbi években egy nagyon fontos technikai előrelépés történt a koincidencia-spektrumok vizsgálatának metodikájában. Hoogenboom [Ho 58] egy szellemes és eredeti elgondolás alapján megépített egy speciális ún. összegező koincidencia-spektrométert, melynek a blokk-sémája a 11. ábrán látható.

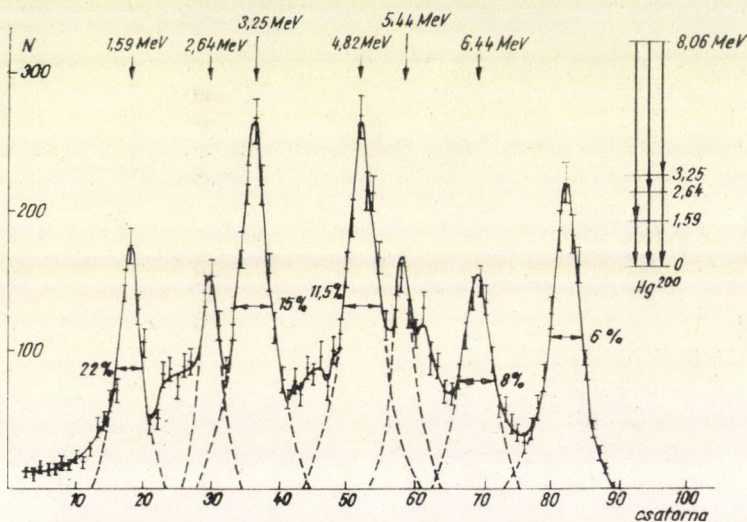
A $D1$ detektorból származó jelek (katód-követőn és erősítőn át) egy sokcsatornás analízátor (A) bemenetére jutnak. Az analízátor kapuzása egy gyors-lassú koincidencia-rendszer (GyK és LK) segítségével történik. A lassú koincidencia-egység bemenetére ad jeleket a berendezés lelkét képező összegező kör (S), amely a két független bemenetére érkező, a két szcintillációs detektorból származó jeleket amplitúdóhűen összeadja. Az összegjeleket felerősítjük és a DD differenciál diszkriminátor csatornáját az összspektrum maximális energiájú csúcsára



11. ábra. A Hoogenboom-féle összegező spektrométer blokk-sémája

állítjuk. Ez a csúcs olyan eseményeknek felel meg, amikor a két regisztrált gammakvantum energiájának összege éppen a neutron kötési energiája és amikor mindkét gamma-sugárzás a szcintillációs detektorokban teljes energiáját elvesztette. Ez a szigorú energia kikötés tehát fizikai szempontból kiválasztja a befogási nívótól az alapnívóig vezető kaszkádokat, detektálástechnikai szempontból pedig a szóban forgó gammasugarak NaJ kristállyal való kölcsönhatásai közül a teljes abszorpciónak megfelelőt. Ennek megfelelően ez a spektrométer kiválóan alkalmas (elsősorban 2 lépcsős) kaszkádfolyamatok vizsgálatára és ugyanakkor megszabadít a szcintillációs számlálók egyik legnagyobb hátrányától, a spektrum komplex voltától. Természetesen a szigorú energiaszűrés következtében az események egy részét elveszítjük és a hatások lényegesen kisebb lesz. Ezt a hátrányt bizonyos mértékig kompenzálja a spektrum viszonylag egyszerű volta.

Az összegező spektrométer alkalmazást nyert az (n , gamma)-reakciók tanulmányozásánál is [Ve59, Bu59, Ur61, Sc61, Dr61, Ca64]. Példaként a 12. ábrán bemutatjuk a $\text{Hg}^{199}(n, \text{gamma})\text{Hg}^{200}$ reakcióból származó gammasugárzás koincidencia spektrumát összegező spektrométerrel mérve [Ve59].



12. ábra. A $\text{Hg}^{199}(n, \text{gamma})\text{Hg}^{200}$ -reakcióból származó gammasugárzás koincidencia-spektruma összegező spektrométerrel mérve (Ve59)

2. e^- —gamma és e^- — e^- koincidenciák

A koincidencia vizsgálatok között megemlíti a két különböző gammaátmenethez tartozó konverziós elektronok, továbbá az egyik átmenet gammasugárzása és a másik átmenet belső konverziós elektronja közötti koincidenciák vizsgálatát. Ilyen jellegű vizsgálatok (n , gamma)-reakciók esetében még nem történtek; végeztek azonban az ilyen mérések elvégzésének lehetőségére vonatkozóan különböző becsléseket, melyek szerint ilyen mérések elvégezhetők, ha az elektron regisztrálására nagyterpszögű toroidális mágneses spektrométert, a gammasugárzás regisztrálására pedig szcintillációs spektrométert használnánk [Ke57, Fr60].

3. Átlagos multiplicitás

Átlagos multiplicitásnak (\bar{v}) nevezzük azt a számot, amely megmondja, hogy egy neutron befogásánál a kérdéses gerjesztett mag által átlagban hány gamma-kvantum emittálódik. A multiplicitás tehát felvilágosítást ad a kaszkádlépcsők átlagos számáról. (Átlagról beszélünk, mert ugyanazon (n , gamma)-reakciónál a gerjesztett mag különböző valószínűséggel különböző kaszkádokon át juthat az alapállapotba.)

Az átlagos multiplicitás összefüggésbe hozható a megfelelően normált, mért gammaspektrummal ($v(E_\gamma)$):

$$\bar{v} = \int_0^{E_b} v(E_\gamma) dE_\gamma,$$

ahol $v(E_\gamma)$ a teljes spektrum E_γ körüli tartományában a gammakvantumok száma egy befogásra és 1 MeV-re számolva. A normalizálás oly módon történhet, hogy az egyes gamma-energiákat megszorozzuk intenzitásukkal és az eredő összegnek könnyen belátható módon a befogási energiával (E_b) kell megegyeznie:

$$\int_0^{E_b} E_\gamma v(E_\gamma) dE_\gamma = E_b$$

Az 50-es években, amikor a gamma-spektroszkópiai módszerek (n , gamma)-reakciók esetében még nem álltak magas színvonalon, a multiplicitás ismerete hasznos információt jelentett. Ma már elég pontosan rendelkezésünkre állnak a különböző (n , gamma)-reakciók esetében az energia spektrumok és ezek természetesen sokkal több információt jelentenek mint a multiplicitás, illetve ha szükséges lenne a multiplicitás értéke, belőlük visszaszámolható. Ily módon a multiplicitás mérése termikus neutronok befogásánál sok vonatkozásban aktualitását veszítette. Bizonyos fokig van még létjogosultsága a rezonancia- és gyorsneutronok befogásánál fellépő gammasugárzás esetében, mivel ezek spektroszkópiája ma még nem kellőképpen fejlett. Emellett sok esetben praktikus szempontból hasznos a multiplicitás ismerete. Ilyen eset pl. ha olyan neutrontektort készítünk, amelynél a neutronbefogás következtében fellépő gammasugárzást detektáljuk, pl. nagyméretű folyadékos szcintillátorral. Ilyenkor két folyadékos szcintillátort szokás alkalmazni, amelyeket a háttér csökkentése érdekében koincidenzába kapcsolunk. Az ilyen típusú neutrontektor effektivitásának meghatározásához szükséges a befogó anyag multiplicitásának ismerete, hiszen ettől jelentősen függ a koincidenzák száma.

A multiplicitás mérések aktualitását az utóbbi években újból felvetette az izomér hatáskeresztmetszet viszony vizsgálata, amelynél a mérési eredményekből elméletileg értékes információt a multiplicitás ismeretének hiányában csak nagyon nehezen, vagy egyáltalán nem nyerhetünk. (L. VII/2.) Éppen ezért az alábbiakban röviden foglalkozunk a multiplicitás mérésének lehetőségeivel.

A kezdeti próbálkozásoktól eltekintve az irodalomban két multiplicitás mérés ismeretes: az egyik *Muehlhause* [Mu50], a másik *Draper* és munkatársai [Dr60a] nevéhez fűződik. *Muehlhause* mérésénél két szcintillációs detektor nézte a targetet, amelyre a termikus neutron esett. Mérté az oldalsatornák beütésszámát (N_1 és N_2) és a két detektor közötti kettes koincidenzák számát (N_c). Ha a koincidenzák

számát elosztjuk az oldalcsatornák átlagos beütésszámával $\bar{N} = \frac{N_1 + N_2}{2}$ a következőt kapjuk:

$$N_1 = N\omega_1\varepsilon_1\bar{v}$$

$$N_c = N\omega_1\omega_2\varepsilon_1\varepsilon_2\bar{v}(\bar{v}-1)$$

$$\frac{N_c}{\bar{N}} = \frac{2\omega_1\omega_2\varepsilon_1\varepsilon_2(\bar{v}-1)}{\omega_1\varepsilon_1 + \omega_2\varepsilon_2} = k(\bar{v}-1),$$

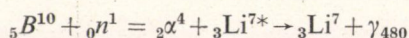
ahol N — a targetben befogódott összes neutronok száma,

ω — a térszög,

ε — a detektorok effektivitása.

Lényegében véve a bal oldalon kísérletileg mért adatok állanak, a jobb oldalon pedig az ismeretlen multiplicitás érték és egy faktor, amely hitelesítő méréssel (pl. Co^{60} segítségével, amelynél $v=2$) meghatározható. E faktor függ ugyan a kaszkádban résztvevő gammasugarak energiájától, azonban a kaszkád egyes tagjai által elérhető energiatartomány általában nem nagyon széles és a faktor energiától való függése gyakorlatilag elég lassú. A fenti formulából láthatóan ez a módszer első sorban a kettes kaszkádokra érzékeny. Nagyobb multiplicitások felé lehet eltolni az érzékenységet, ha több detektort és magasabbrendű koincidenciákat használunk. Ilyen próbálkozások még nem történtek. Meg kell jegyeznünk, hogy a Muehlhause által alkalmazott koincidencia módszer a valóságosnál kissé magasabb multiplicitás értéket szolgáltat.

Draper egy másik utat választott: egyetlen szcintillációs számlálóval mérte a vizsgálandó (n , gamma)-reakcióból származó gammasugarak intenzitását és ezt összehasonlította egy ismert multiplicitású reakcióból származó gammaintenzitással. Multiplicitás etalonként az alábbi reakció szolgált:



Ebben a reakcióban az esetek 93,5%-ban a Li^7 -mag gerjesztett állapotban keletkezik és ebből 480 keV-es gammakvantum emissziójával megy át az alapállapotba. Ennek megfelelően a multiplicitás: $\bar{v}=0,935$.

A két intenzitás hányadosa természetesen nemcsak a multiplicitások hányadosától függ, hanem teljesen azonos geometriai elrendezés esetén a különböző targetekben bekövetkezett befogások számától, ill. ezek hányadosától is. Ezt a hányadost külön mérte: megmérte neutrondetektorral a neutronfluxust targettel és target nélkül, a két fluxus különbsége megadja a targetben elnyelődött neutronok számát. Ez a módszer egyszerűbb mint a Muehlhause-é. *Draper* méréseit nemcsak termikus neutronokkal végezte, hanem kiterjesztette a rezonancia-tartományra is.

E két szerző mérési eredményeit, valamint *Grosev* számolási eredményeit az I. táblázatban foglaltuk össze. Megjegyezzük, hogy a táblázat tanúsága szerint — bár az átlag multiplicitás csak nagyon durván tükrözi vissza a mag szerkezetét — értékének magról-magra való változása nem független a mag bizonyos általános tulajdonságaitól, így pl. a héjszerkezettől. Érthető összefüggés áll fenn a spektrum

I. TÁBLÁZAT

Végmag	Rezonancia energia (eV)	M u l t i p l i c i t á s		
		Draper [Dr60a]	Muehlhause [Mu50] (termikus)	Grosv
Ag ¹¹⁰	5,2	5,0 ± 0,3	2,9	4,0
Cd ¹¹⁴	0,18	4,1 ± 0,3	4,1	4,0
In ¹¹⁶	1,5	4,4 ± 0,2	3,3	4,4
	3,9	5,6 ± 0,4		
	9,1	4,2 ± 0,4		
Sm ¹⁵⁰	0,10	6,2 ± 0,3	5,6	4,7
	0,88	5,0 ± 0,4		
Sm ¹⁵³	8,0	4,1 ± 0,5		
Eu ¹⁵²	0,46	4,4 ± 0,3	3,8	3,5
	1,0	3,4 ± 0,7		
Gd ¹⁵⁸	0,03	4,6 ± 0,2	3,9	4,5
Gd ¹⁵⁶	2,6	3,9 ± 0,4		4,5
Dy ¹⁶⁵	neg.	3,1 ± 0,2	3,7	3,9
Ho ¹⁶⁶	3,9	3,0 ± 0,3		
Er ¹⁶⁸	0,47	4,7 ± 0,3		5,6
	6,0	4,2 ± 0,3		
Tm ¹⁷⁰	3,9	3,7 ± 0,3		
Lu ¹⁷⁷	0,14	4,35 ± 0,25		
	1,6	4,0 ± 0,3		
	2,6	4,4 ± 0,3		
Hf ¹⁷⁸	1,1	4,2 ± 0,2	{ 3,8 4,1 ± 0,2	4,7
	2,4	4,3 ± 0,2		
Au ¹⁹⁸	4,9	3,8 ± 0,3	3,5	3,9

Az alábbiakat csak Muehlhause mérte termikus neutronokra [Mu50]:

Na ²⁴	< 2	Ge ⁷⁴	~ 4
Al ²⁸	~ 2	As ⁷⁶	2,7
Cl ³⁶	3,1	Br	3,4
V ⁵²	2,5	Nb ⁹⁴	2,6
Mn ⁵⁶	2,6	La ¹⁴⁰	2,7
Cr ⁵⁴	2,3	Re	3,2
Fe	1,7	Ir	3,6
Cu	2,6	Hg	3,3

komplex volta és a multiplicitás értéke között is. A rezonancia-tartományt illetően látható, hogy a rezonancián mért multiplicitás értékek nem nagyon térnek el a termikus értéktől.

Végezetül megemlítjük, hogy az átlagos multiplicitás értéke a statisztikus elmélet alapján becsülhető. A közelítő formula [Gr58c]:

$$\bar{\nu} \approx \frac{2\sqrt{aE_0}}{2L+2}, \quad (3)$$

ahol E_0 a gerjesztési energia, L a gammasugárzás multipolaritása, a pedig

$$a = 0,125 \text{ A.}$$

IV.

Szöghkorrelációs vizsgálatok

Ha két egymást követő gamma-kvantum egymáshoz viszonyított szögeloszlását, az ún. szöghkorrelációt kísérletileg meghatározzuk, akkor általános esetben meghatározható az érintett nívók spinje, a gammaátmenetek jellege és multipolaritása. Éppen ezen értékes információk miatt a gamma-gamma szöghkorreláció-mérés egyike a magspektroszkópia legfontosabb módszereinek.

1. A szöghkorreláció mérés elvi alapjai

A szöghkorrelációs mérések elméletének világos és áttekinthető összefoglalása több helyen megtalálható [Bi 53, F 55, D 57, Bi 60], ezért jelenleg csak a legfontosabb végkövetkeztetések ismertetésére szorítkozunk.

Vizsgáljuk a 13. ábrán látható L_1 és L_2 multipolaritású átmeneteket. Nem orientált magok esetében a J_a impulzusmomentumú nívók teljesen véletlenszerűen vannak orientálva és ennek megfelelően az L_1 gammasugárzás izotróp eloszlású és a J_b közbenső nívó nem orientált. Ha azonban kísérletileg egy adott irányban megfigyeljük az L_1 gammasugárzást, akkor a mágneses kvantumszámban különböző közbenső magnívók nem egyforma valószínűséggel fordulnak elő. Ezt a tényt könnyen megérthetjük, ha figyelembe vesszük, hogy jól definiált mágneses kvantumszámmal rendelkező magnívók közötti elektromágneses átmenetek általában anizotróp szögeloszlást mutatnak, azaz a gammakvantumok egy megadott irányban maximális valószínűséggel emittálódnak, míg más irányokba való emissziójuk valószínűsége kisebb vagy éppen nulla. Ennek a következménye, hogy ha kiválasztunk egy meghatározott irányba emittált L_1 gamma-kvantumokat, akkor a közbenső állapotban visszamaradt magok többé-kevésbé orientáltak lesznek.

Az orientált mag által kibocsátott L_2 gamma-sugárzás szögeloszlása ugyancsak anizotróp lesz a közbenső mag orientációjához képest, azaz következőképpen az L_1 gammasugárzás irányához képest is. Az egymást követő gammakvantumok között tehát szöghkorreláció áll fenn.

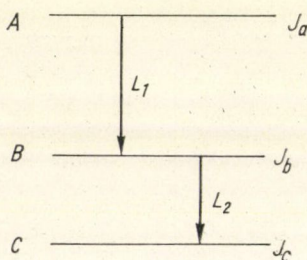
Mint ismeretes az átmenetek L_1 és L_2 multipolaritása a kiválasztási szabályok következtében az alábbi korlátok közé szorítható:

$$|J_a - J_b| \leq L_1 \leq |J_a + J_b|$$

$$|J_b - J_c| \leq L_2 \leq |J_b + J_c|.$$

A kaszkád két fotonjának egymáshoz képest Θ szögben való kilépésének valószínűségét, a szöghkorrelációs függvényt ($w(\Theta)$) az alábbi — az impulzusmomentum kvantumelmélete alapján levezethető — elméleti formula adja meg:

$$w(\Theta) = \sum_{k=0}^{k_{\max}} A_k [J_a(L_1) J_b(L_2) J_c] P_k(\cos \Theta). \quad (4)$$



13. ábra. Általános nívóséma

E formulában $P_k(\cos \Theta)$ a k -adik Legendre-polinom, A_k pedig a k -adik szögkorrelációs együttható. A k nem vehet fel tetszőleges értéket. Például gamma-gamma szögkorrelációnál, ha a sugárzás polarizációját nem mérjük, a k csak páros értékeket vehet fel. Továbbá lesz egy maximális értéke k -nak az alábbi kiválasztási szabály szerint:

$$k_{\max} = \min(2J_b, 2L_1, 2L_2).$$

Az utóbbi kiválasztási szabályból következik, hogy ha a közbenső nívó spinje 0 vagy $1/2$, akkor a szögkorreláció izotróp.

Az A_k szögkorrelációs együtthatók értékei (amelyek egyébként Clebsch—Gordan és Racah együtthatók kombinációit tartalmazzák) különböző spinek és multipolaritások esetére táblázatokban megtalálhatók (pl.: [Bi 53, Ta 60, Ka 64, Ap 3] stb.).

Az előzőekben ún. tiszta átmeneteket vettünk alapul. Előfordulhat azonban, hogy a kaszkád átmenetek egyike vagy másika vagy akár mind a kettő ún. kevert típusú, azaz amelyekben az impulzusmomentum kiválasztási szabály által megengedett legkisebb L értékű multipól átmenet mellett az ennél 1-gyel nagyobb $L+1$ értékű multipól átmenet is jelentős valószínűségű. A nagyobb multipolaritású átmenet keveredésének arányát jellemzi az ún. keverési paraméter δ , amely a kétféle átmenetre vonatkozó redukált mátrixelemek hányadosa:

$$\delta = \frac{\langle J_v \| L+1 \| J_k \rangle}{\langle J_v \| L \| J_k \rangle}$$

A keverési paraméter négyzete a két sugárzás intenzitásának a hányadosát adja meg.

Kevert átmenetek esetén a két különböző multipolaritású sugárzás között interferencia lép fel. Ha pl. feltételezzük, hogy az első átmenet kevert, akkor a tiszta átmenetre vonatkozó szögkorrelációs függvénnyel analóg kifejezésre jutunk, azonban az A_k együtthatókat a következőképpen kell értelmeznünk:

$$A_k(\delta) = \frac{A_k^I + \delta^2 A_k^{II} + 2\delta A_k^{III}}{1 + \delta^2} \quad (5)$$

Az I. index az L_1 típusú tiszta átmenetre, a II. pedig az (L_1+1) típusú tiszta átmenetre vonatkozik, míg a III. index által jelzett szögkorrelációs együttható mind az L_1 -től, mind az (L_1+1) -től függ, és a két tiszta átmenet interferenciája következtében lép fel.

Összegezve megállapíthatjuk, hogy a szögkorrelációs koeficiensek elméletileg kiszámolhatók és értékük függ az érintett három nívó spinjétől és az érintett két átmenet multipolaritásától, továbbá általános esetben a keverési paraméterektől. Ha kísérletileg meghatározzuk a szögkorrelációs függvényt, akkor a kísérletileg kapott szögkorrelációs koeficiensek értékét kell összevetnünk az elméletileg számolt értékkel. Ha a három spin és két multipolaritás közül csak egy vagy kettő ismeretlen, akkor az összevetésből szerencsés esetben eldönthetjük az ismeretlen paraméterek (spin vagy multipolaritás) értékét. Az összevetést megnehezíti a keverési paraméter értékének ismeretlen volta. Az előzőekben említett táblázatok egyébként a szögkorrelációs koeficienseket a keverési paraméter értékének függvényében tartalmazzák. Szerencsés esetben az összevetés lehetséges és a δ értéke is megadható.

2. Mérési metodika

A kísérleti feladat tehát a következő: két energiaérzékeny gammadetektor közül az egyiket ráállítjuk a szóban forgó kaszkád egyik gammaátmenetének az energiájára, a másikat pedig a másik gammaátmenet energiájára. Mérjük a koincidenciák számát a két detektor által bezárt szög különböző értékeinél. Detektorként csak szcintillációs detektor jöhet számításba nagy határfoka miatt.

Az (n , gamma)-reakcióknál végzett szögkorrelációs mérések metodikájára vonatkozóan általánosságban a következőket jegyezzük meg.

Neutronforrásként intenzitási okokból jelenleg csak termikus reaktor jöhet számításba. A háttér csökkentése érdekében kívánatos tiszta termikus nyalábok előállítása. A II/1. pontban megismert lehetőségek mindegyike számításba jöhet. Leggyakrabban a bizmut szűrős megoldást használják (pl. [KD61]). Kvarc egykristály szűrőt használt pl. White [Wh63b]. A nyaláb ólom-egykristályon való reflexióját használja fel pl. Manning és Bartholomow [Ma59], bár — mint említettük — ennél a megoldásnál az intenzitáviszonyok kedvezőtlenek. Szelektor típusú mechanikus szűrő (n , gamma)-reakció szögkorrelációs vizsgálatainál való felhasználására még nem történt próbálkozás.

A rendszerint henger alakú, néhány mm-től néhány cm-ig terjedő méretű, általában préselt target a kollimált neutronnyalábban nyer elhelyezést. A target a két szcintillációs detektor által leírható kör középpontjában kell, hogy legyen. A centrikus elhelyezés fontos, nehogy méréseinket apparatív aszimmetria hamisítsa meg. Ezért általában a target helyzete finoman állítható. A neutronfluxusnak nyalábon belüli nem egyenletes eloszlása is okozhat aszimmetriát; ezért néhány szerző a targetet saját tengelye körül a mérés során egyenletesen forgatja [Co64]. Az esetleg még megmaradó aszimmetria csökkentése érdekében célszerű a 180° -ra szimmetrikus szögeken külön mérni, majd a mért értékeket ellenőrzés után összegezni. Növeli az eredmények megbízhatóságát, ha a különböző szögeknél mért koincidenciák számát elosztjuk a mozgó detektor ugyanezen szögnél mért beütésszámával.

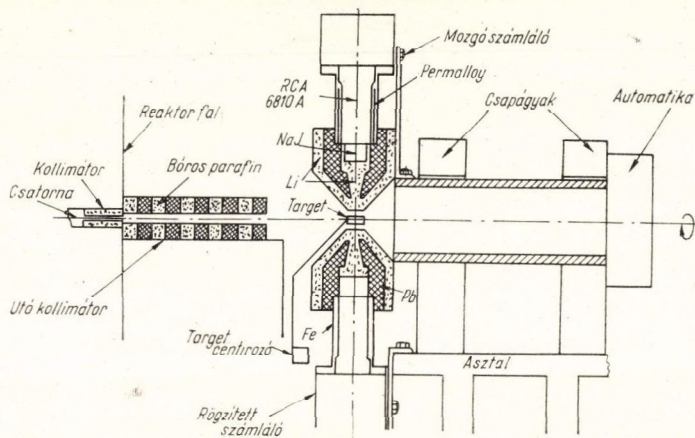
Külön problémát okoz a háttér, amelynek a következő komponensei lehetnek:

- a) reaktorból származó gamma-sugárzás,
- b) a targetből a detektorba beszórt neutronok,
- c) a környezetben befogódott neutronok által kiváltott gamma-sugárzás.

Az a) komponens elleni védekezés azonos a tiszta nyaláb előállítására irányuló törekvéssel. A másik két komponens elleni védekezés céljából a detektorokat ólom és lítium köpennyel vesszük körül. Az ólomköpenynek a target felé eső részén egy nyílás van a gammasugarak szabad útjának biztosítása végett; ezt a nyílást is célszerű lítiummal kitölteni. (A bórkarbid ezen a helyen nem használható — bár hatás keresztmetszete nagyobb —, mert a neutronok hatására gammasugarakat szolgáltat.) A b) komponens csökkentése érdekében a targetet dúsított Li^6 hengerrel szokás körülvenni, amely targetből kiszóródó termikus neutronokat nagy valószínűséggel elnyeli anélkül, hogy ennek következtében gammasugárzás lépne fel.

A szokásos mérési elrendezés illusztrálásaként hivatkozunk saját mérési elrendezésünkre (14. és 32. ábra).

A detektorok jelei egy gyors-lassú koincidenciarendszerre jutnak. A lassú ágba beiktatott differenciál diszkriminátor segítségével választjuk ki a mérés tárgyát képező egyik gammaátmenetet. Az ezzel koincidenzában levő spektrum a másik ágon át sokcsatornás analízatorba jut. Lényegesen lerövidíthetjük a mérési

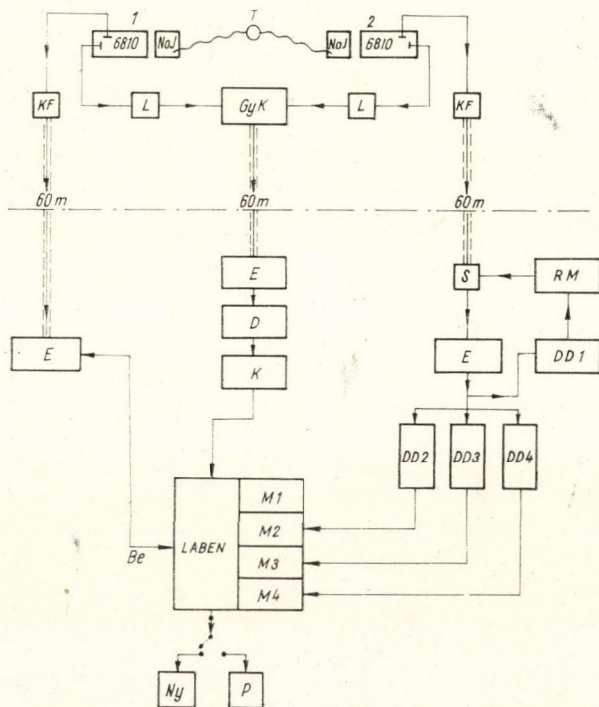


14. ábra. Szögkorrelációs mérési elrendezés

időt és csökkenthetjük az instabilitás hatását, ha többdimenziós analízátort használunk, amely az egyik detektor minden egyes gammaenergiájához a másik detektorba tartozó gammaspektrumot rögzíti és így lehetővé teszi egyidejűleg több gamma-

átmenet szögkorrelációjának mérését (pl. [KD, Ka 62].) A szokásos elektronikus mérőberendezés blokk-sémáját és részleteit illetően példaként utalunk saját mérőberendezésünkre (15. és 33. ábra).

Gyorsan bomló radioaktív preparátumok szögkorrelációjának vizsgálataira kidolgoztak olyan módszereket, amelyeknél nem két detektor közötti szöget változtatunk az egyik detektor mozgatásának segítségével, hanem egyidejűleg több, különböző szöghelyzetben elhelyezett szcintillációs detektor regisztrálja a gammasugárzást [Ge 57, De 61, Sh 62]. A kapcsolódó elektronikus berendezés regisztrálja az összes alkalmazott detektorpárok közötti koincidenциákat. Ez a megoldás a mérési időt lerövidíti, pl. 11 detektor alkalmazása esetén mintegy a századrészére. Ilyen ún. multikoincidenциás



15. ábra. Szögkorrelációs elektronikus mérőberendezés blokk-diagramja

goniométereket ezideig még nem használtak termikus neutron befogást követő gammasugárzás szögkorrelációjának vizsgálatára, aminek oka abban keresendő, hogy a különböző szcintillációs detektorok erősítésének pontosan egyformára való beállítása és az itt szükséges hosszú mérési idők alatt konstanson tartása technikailag nagyon nehezen oldható meg. A nem tökéletes megoldásból származó apparatív aszimmetria viszont erősen eltorzítja az általában amúgy sem nagymértékű fizikai aszimmetriát.

3. Korrekciók

Az (n , gamma)-reakciónál végzett szögkorrelációs vizsgálatok általában több hetes ill. hónapos mérést igényelnek. Érthető módon metodikailag célszerű az összmérési idő alatt minden egyes szögön több mérést végezni, azaz viszonylag rövid idejű periodicitással változtatni a szöghelyzetet. A mérés végén az azonos szögekhez tartozó spektrumokat összegezzük és végeredményként minden egyes szögnél egy koincidenca-spektrum áll rendelkezésünkre.

Ebben a koincidenca-spektrumban megkeressük a mérés szempontjából érdekes gammaátmenetnek megfelelő foto- vagy párképzési csúcsot. Az ez alatti területet fogadjuk el a vizsgált átmenet intenzitásának. A terület meghatározásánál figyelembe kell vennünk a nagyobb energiájú gammasugárzástól származó Compton-háttérrel, amelynek az értékét vagy a koincidenca-spektrum alapján vesszük figyelembe, vagy szerencsés esetben külön méréssel meghatározhatjuk.

Végeredményben minden szögre kapunk egy koincidenca beütésszámot (csúcs alatti területet). Figyelembe kell azonban vennünk, hogy az elméletileg levezetett (4) szögkorrelációs formulánk pontszerű targetre és pontszerű detektorra vonatkozik. A valóságban e feltételek egyike sem teljesül, ezért a mérési eredményeket az elméleti értékkel való összevetés előtt korrigálnunk kell

- a) a target véges átmérőjére,
- b) a detektor véges méretére,
- c) a target hosszára,
- d) a neutronfluxus targetbeli abszorpciójára,
- e) a keletkezett gammasugárzás targeten belüli kölcsönhatására.

A target véges átmérőjére vonatkozó korrekciót a mért koincidenciaszámon kell elvégeznünk. Az irodalomból ismeretes korrekciós formula [Wh63a]:

$$N_c(\Theta)_{\text{kor}} = \frac{N_c(\Theta)_{\text{mért}}}{1 + cQ^2(1 + g \cos \Theta)}$$

$$c = \frac{0,216}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{\frac{1}{2h^2} + \frac{1}{2h} \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} \right)}{1 - \frac{8Q}{3\pi} \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} \right) + \frac{Q^2}{2} \left(\frac{1}{\lambda_1^2} + \frac{1}{\lambda_1 \lambda_2} + \frac{1}{\lambda_2^2} \right)} \quad (6)$$

$$g \sim 1 - \left(\frac{d_1}{4h_1} \right)^2 - \left(\frac{d_2}{4h_2} \right)^2,$$

ahol h — a kristály távolsága a targettől,
 λ — a gammasugárzás szabad úthossza a targetben,
 q — a target sugara,
 d — a kristály átmérője.

Ismerve geometriai paramétereinket, a korrekció minden egyes konkrét esetben a formula segítségével elvégezhető. A korrekciós formula azt a tényt fejezi ki, hogy a keletkezett gammasugárzás targeten belüli abszorpciója nem egyformán jelentkezik a két detektor különböző szögállásánál. A korrekció különösen nagy tömegszámú targetmagoknál, nagy targetátmérőnél és kis gammaenergiáknál számottevő. E korrekció értékének ésszerű határ alá való szorítása konkrét esetekben felső határt szab a target átmérőjére. Illusztrációként a II. táblázatban bemutatjuk a mért és korrigált értékek hányadosát néhány különböző rendszámú magnál, néhány target-sugárnál olyan kaszkádokra, amelyeknél a kaszkádtagok energiái rendre 0,1—0,1, 0,1—6, 0,3—4 és 2—6 MeV. A számításnál felhasznált értékek $h = 12$ cm, $d = 4,4$ mm.

A korrigált koincidenciaszám értékekkel kiszámoljuk az A_k szögkorrelációs koefficienseket (l. e fejezet 4. pont). A további korrekciókat a szögkorrelációs koefficienseken kell elvégezni. Legjelentősebb ezek közül a detektor véges méretére vonatkozó korrekció. A korrekciós faktorok (Q_2 és Q_4), amelyekkel az A_2 illetve

II. TÁBLÁZAT

$E_1 - E_2$ MeV	q mm	^{22}Ti	^{28}Ni	^{51}Sb	^{82}Pb
0,1—0,1	3 90°	0,954	0,762	0,285	0,015
	3 180°	0,999	0,995	0,957	0,467
	6	0,841	0,466	0,091	0,004
	10	0,997	0,981	0,854	0,180
		0,697	0,240	0,035	0,0013
		0,993	0,949	0,679	0,073
0,1—6	3	0,989	0,957	0,940	0,636
		0,999	0,992	0,999	0,990
	6	0,954	0,892	0,820	0,305
		0,999	0,998	0,996	0,963
	10	0,891	0,789	0,628	0,120
		0,998	0,995	0,990	0,903
0,3—4	3	0,996	0,986	0,984	0,970
		0,999	0,999	0,999	0,999
	6	0,982	0,942	0,935	0,929
		0,999	0,999	0,999	0,999
	10	0,945	0,856	0,860	0,919
		0,999	0,997	0,997	0,998
2—6	3	0,998	0,994	0,996	0,991
		0,999	0,999	0,999	0,999
	6	0,991	0,976	0,983	0,957
		0,999	0,999	0,999	0,999
	10	0,974	0,929	0,952	0,878
		0,999	0,999	0,999	0,998

A_4 koefficienseket meg kell szorozni, az irodalomban tabellázva illetve grafikusan megtalálhatók különböző kristályméretre, target-detektor távolságra, gamma-energiára [Wh63a, Ka64, App4, St59]. A Q -k értéke 1-nél kisebb, ami tükrözi azt a tényt, hogy a véges detektorméret az anizotrópia elmosásának irányában hat. Példaként a 16. ábrán láthatjuk a Q_2 és Q_4 értékeit 5×5 cm-es kristály esetében. Mint az ábrából láthatjuk, a korrekció elsősorban kisenergiájú gammasugárzás esetében jelentős. Az ábrán látható, hogy a görbék szétválnak: a felső ág akkor használandó, amikor a mérésnél csak a fotocsúcsot vettük figyelembe, az alsó, amikor az egész gammaspektrumot.

A többi korrekció a tapasztalat szerint általában elhanyagolható, ha mégis szükséges, az irodalomban megadott formulák segítségével elvégezhető [Wh63a].

4. Statisztikus kiértékelés [Ja65, Ru62]

A szöghkorrelációs függvény meghatározása céljából beütésszám méréseket végzünk a $\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_q, \dots, \Theta_r$ szöghelyeken. Legyenek a különböző szögeknél azonos mérési idő alatt mért beütésszámok (illetve a koincidenciaspektrum megfelelő csúcsai alatti területek) $n_1, n_2, \dots, n_q, \dots, n_r$. A beütésszámok valószínűségi változók és tudjuk, hogy várható értéküket az ismert alakú, de ismeretlen paramétereket tartalmazó elméleti szöghkorrelációs függvény adja meg:

$$w(\Theta) = A_1 b_1(\Theta) + A_2 b_2(\Theta) + \dots + A_\sigma b_\sigma(\Theta) + \dots + A_s b_s(\Theta),$$

ahol a $b_\sigma(\Theta)$ függvény meghatározott rendű Legendre-polinom:

$$b_\sigma(\Theta) = P_{v_\sigma}(\cos \Theta).$$

Gamma-gamma szöghkorrelációnál: $v_\sigma = 2(\sigma - 1)$.

Kérdés, hogy milyen A_σ paraméter* értékek mellett lesz a kifejezés olyan, hogy a függvény értékét minden szögnél a mért beütésszám adatok várható értékeként a legnagyobb valószínűséggel lehessen elfogadni. Látható tehát, hogy a kiértékelés lényegében véve a görbeillesztés statisztikus problémája. Ilyen esetekben a legnagyobb valószínűség módszere vagy a súlyozott legkisebb négyzetek módszere alkalmazható. Esetünkben a két módszer által szolgáltatott eredmény statisztikus pontossága alig tér el egymástól; a súlyozott legkisebb négyzetek módszere ugyanakkor számítástechnikailag egyszerűbb. Éppen ezért az alábbiakban az utóbbi módszert követjük. A minimum kikötés az alábbi egyenlethez vezet:

$$\sum_{q=1}^r \omega_q (n_q - w_q) \frac{\partial w_q}{\partial A_\tau} = 0,$$

ahol ω_q statisztikus súlyfaktor, amely Poisson-eloszlást tételezve fel: $\omega_q \sim \frac{1}{n_q}$. Ha a minimumegyenletbe behelyettesítjük a w_q kifejezését, némi átrendezés után minden egyes τ értékre az alábbi formulát kapjuk:

$$\sum_{q=1}^r \omega_q n_q b_{\tau q} = \sum_{\sigma=1}^s \bar{A}_\sigma \sum_{q=1}^r \omega_q b_{\sigma q} b_{\tau q},$$

* A_σ a valódi szöghkorrelációs koefficiens; a kísérletileg mért értéket megkülönböztetésül \bar{A}_σ -val jelöljük.

ahol b_{τ_e} a Legendre-polinom τ rendű, Θ_e szöghöz tartozó értéke: $b_{\tau_e} \equiv b_{\tau}(\Theta_e)$.

Ebből az egyenletrendszerből kell kifejeznünk az s darab együtthatót, feltételezve, hogy $r > s$, azaz több ponton végezhetünk méréseket, mint ahány ismeretlen paraméter van a problémában. Kihasználva a mátrix algebra lehetőségeit, vezessük be a következő jelöléseket:

$$\sum_{e=1}^r \omega_e b_{\sigma_e} b_{\tau_e} = Q_{\sigma\tau},$$

$$\sum_{e=1}^r \omega_e n_e b_{\tau_e} = R_{\tau}.$$

A fenti két egyenletnek megfelelően tehát úgy fogjuk fel a problémánkat, hogy az \bar{A}_{σ} és R_{τ} egy s komponensű A és R vektor komponensei, a $Q_{\sigma\tau}$ értékek pedig egy $s \times s$ négyzetes Q mátrix elemei. Ezt figyelembe véve a minimumegyenletünk mátrix alakban írható:

$$R = \tilde{Q} \bar{A} = Q \bar{A}.$$

Itt a hullámos felülhúzás transzponáltat jelent. A második egyenlőség a Q mátrix szimmetriájából következik. Ebből az egyenletből a bennünket érdeklő A vektor a Q inverzének (Q^{-1}) segítségével kifejezhető:

$$\bar{A} = Q^{-1} R, \quad (7)$$

Komponensekben kiírva:

$$\bar{A}_{\sigma} = \sum_{\tau=1}^s (Q^{-1})_{\sigma\tau} R_{\tau}.$$

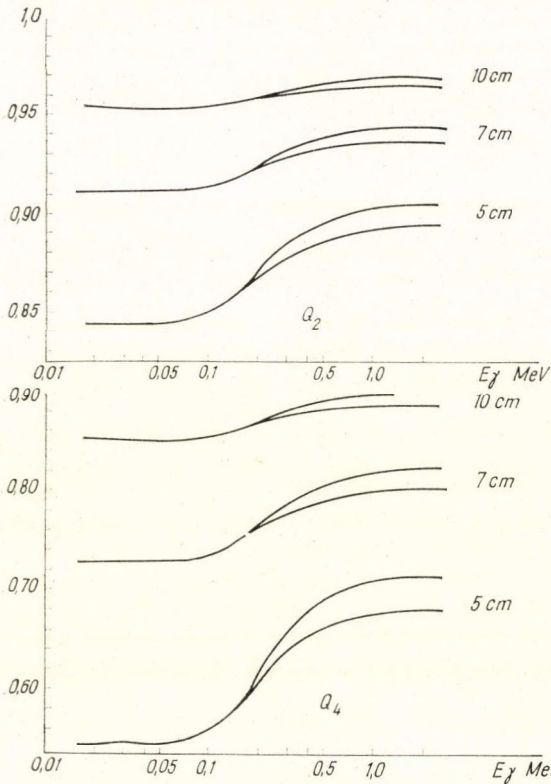
Az ismertett mátrix formalizmus egyik előnye, hogy azonnal

szolgáltatja (aránylag egyszerű számítás után) a statisztikus hiba értékét is, mint a felhasznált Q mátrix diagonális elemeit:

$$\langle (\delta \bar{A}_{\sigma})^2 \rangle = (Q^{-1})_{\sigma\sigma}. \quad (8)$$

Az elméletileg számolt szöghkorrelációs függvényt úgy szokás normálni, hogy a Legendre-polinomok sora az egységgel kezdődjék:

$$w_e = 1 + a_2 b_{2e} + a_3 b_{3e} + \dots + a_s b_{se}.$$



16. ábra. Az A_2 és A_4 szöghkorrelációs együtthatóknak a véges detektor méret következtében szükséges korrekciós faktorai (Q_2 és Q_4), [Ka 64, App 4]. A NaJ kristály mérete: 50×50 mm. A kristály távolsága a targettől, mint paraméter van feltüntetve

Az „ a ” és „ A ” koeficiensek közötti kapcsolat nyilvánvalóan

$$a_{\sigma} = \frac{A_{\sigma}}{A_1} \sim \frac{\bar{A}_{\sigma}}{\bar{A}_1} = \bar{a}_{\sigma}. \quad (9)$$

Ha az A -hoz tartozó \mathbf{Q} mátrixhoz hasonlóan bevezetünk az a -hoz egy \mathbf{O} mátrixot, akkor a hiba:

$$\langle (\delta \bar{a}_{\sigma})^2 \rangle = (\mathbf{O}^{-1})_{\sigma\sigma}. \quad (10)$$

A mátrix formalizmus felhasználása azzal a további előnnyel jár, hogy az \bar{A}_k együtthatók kiszámolása könnyen programozható elektronikus számológépre. Ilyen programozás esetén a számológépnek be kell adni a \mathbf{b} mátrix $s \times r$ elemét, az r darab n beütésszámmértéket és a háttérértékét. Eredményként megkapjuk az \bar{A}_{σ} és \bar{a}_{σ} koeficienseket hibáikkal együtt.

5. Szögkorrelációmérések az (n , gamma)-reakciók terén

A szögkorrelációs mérések (n , gamma)-reakciók esetében való alkalmazását elsőnek Trumpy javasolta 1957-ben, azóta számos spinmeghatározás történt ezzel a módszerrel, amelyeknek eredményei a III. táblázatban találhatók.

Az (n , gamma)-reakciónál végzett szögkorrelációs spin és multipolaritás meghatározások nem tartoznak a technikailag könnyű mérések közé. Az egyik, inkább elvi jellegű nehézség, hogy ha nem tiszta átmenetekről van szó, akkor a keverési paraméter általában nem ismert értéke nehézzé illetve néha lehetetlenné teszi egyértelmű spinérték megadását. Egy másik nehézség, hogy a befogási nívóról kiinduló átmenet lehet inkohereus keveréke a $J_0 + \frac{1}{2}$ és a $J_0 - \frac{1}{2}$ spinértékhez tartozó sugárzásoknak, amelyeknek esetleg mindegyike hozzájárul a befogáshoz, — feltételezve, hogy a kérdéses átmenet mind a két spin esetében lehetséges. Ilyenkor a mért szögkorrelációs függvény két szögkorrelációs függvény inkohoreus összege és az egyes függvények a hozzájuk tartozó sugárzás relatív intenzitása szerint vannak súlyozva. A súlyozási faktort elvben meg lehetne határozni polarizált neutronoknak polarizált targeten való transzmissziójából [S63], azonban kevés ilyen mérés ismeretes és ezért a szükséges súlyfaktorok általában nem állnak rendelkezésünkre. Természetesen egyértelművé válik a helyzet abban a szerencsés esetben, ha a $J_0 = 0$, mivel ekkor csak egyféle spinállapottal valósulhat meg a befogás (1/2).

A technikai nehézségek közül elsősorban kell megemlékeznünk a szcintillációs detektorok sajátságaként kialakult rendkívül bonyolult amplitúdóspektrumról, amely nagyon megnehezíti az egyértelmű energiakiválasztást. Problémát okoz a nagyobb energiájú gammasugárzás Compton-szórásából származó háttér pontos figyelembevétele. Általában a háttérproblémák aránytalanabban súlyosabbak, mint a hasonló, preparátumokkal végzett méréseknél. Az általában nem kedvező intenzitáviszonyok miatt a megfelelő statisztikus pontosság elérése hosszú idejű méréseket igényel, amely szigorú követelményeket támaszt a berendezés stabilitásával szemben.

Mindezen nehézségek ellenére a gerjesztett nívók spinjének meghatározására szolgáló mérés technikailag általában nehéz módszerek (pl. az inelasztikus neutron-szórásnak, a befogási gammasugarak cirkuláris polarizációjának*, a (d, p)-reak-

* VI.

III. TÁBLÁZAT

Végmag	Energia (MeV)			J			
	kezdeti	közbenő	vég	kezdeti	közbenő	vég	
N ¹⁵	10,83	6,32	0	1/2, 3/2	3/2	1/2	[Ba 64]
Mg ²⁵	7,33	3,41	0	1/2	3/2	5/2	[Ma 59]
Si ²⁹	8,47	4,93	0	1/2	3/2	1/2	[Ma 59]
Si ²⁹	8,47	1,28	0	1/2	3/2	1/2	[Ma 59]
P ³²	7,92	3,26	0	0,1	2	1	[Ma 59]
P ³²	7,92	1,15	0,08	0,1	1	2	[Ma 59]
S ³³	8,65	3,23	0	1/2	3/2	3/2	[Tr 57, Ma 59]
S ³³	8,65	5,7	0	1/2	1/2	1/2	[KD] [Mi 66]
Cl ³⁶	8,574	1,165	0	1	1	2	[Tr 57, Lo 62, Lo 64]
Cl ³⁶	8,574	0,787	0	1	3	2	[Tr 57, Lo 62, Lo 64]
Ca ⁴⁵	7,42	2,24	0	1/2	3/2	7/2	[Co 64]
Ti ⁴⁸	8,132	1,378	0	1/2	3/2	7/2	[Kn 59, KD 61]
Ti ⁴⁸	1,718	1,378	0	1/2	3/2	7/2	[Kn 59, KD 61]
Cr ⁵⁴	9,72	0,84	0	1,2	2	0	[Tr 57, Wh 63b, Gu 63]
Cr ⁵⁴	2,62	0,84	0	2	2	0	[Wh 63b, Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	2,62	0,84	1,2	2	2	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	2,82	0,84	0	0,2	2	0	[Wh 63h, Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	2,82	0,84	1,2	0,2	2	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	3,07	0,84	0	2,3	2	0	[Wh 63b, Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	3,07	0,84	1,2	2,3	2	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	3,41	0,84	0	2	2	0	[Wh 63b, Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	3,41	0,84	1,2	2	2	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	3,72	0	1,2	1,2	0	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	4,86	0	1,2	1,2	0	[Gu 63]
Cr ⁵⁴	9,72	5,28	0,84	1,2	0	2	[Gu 63]
Fe ⁵⁵	9,298	0,413	0	1/2	1/2	3/2	[Co 64]
Fe ⁵⁷	7,64	0,365	0	1/2	3/2	1/2	[Ba 64]
Ni ⁵⁹	9,000	0,470	0	1/2	1/2	3/2	[Tr 57, Co 64]
Ni ⁵⁹	9,000	0,870	0	1/2	3/2	3/2	[Co 64]
Ni ⁵⁹	9,000	1,310	0	1/2	1/2	3/2	[Co 64]
Ni ⁶¹	7,82	0,284	0	1/2	1/2	3/2	[Co 64, Za 64]
Ni ⁶³	6,84	0,158	0	1/2	3/2	5/2	[Co 64]
Ni ⁶³	6,84	0,526	0	1/2	3/2	5/2	[Co 64]
Ni ⁶³	6,84	1,008	0	1/2	1/2	5/2	[Co 64]
Cu ⁶⁴	7,916	0,28	0	1,2	1,2	1	[Tr 57, Ba 64]
Cu ⁶⁴	7,916	0,61	0	1,2	1,2	1	[Tr 57, Ba 64]
Y ⁹⁰	6,849	0,777	0	0,1	2	2	[Ba 59]
Y ⁹⁰	6,849	0,202	0	0,1	3	2	[Ba 59]
Zr ⁹²	8,66	2,33	0,93	2,3	3	2	[Ba 64]
Zr ⁹²	2,33	0,93	0	1,3	2	0	[Ba 64]
Mo ⁹⁶	1,61	0,77	0	4	2	0	[Lo 62]
Te ¹²⁴	9,40	0,60	0	1	2	0	[Ba 60a]
Nd ¹⁴⁴	7,81	0,69	0	3	2	0	[Ba 60a]
Gd ¹⁵⁸	7,923	1,182	0	2	2	0	[Ba 60a]
Hg ²⁰⁰	8,04	1,59	0	0	1	0	[Ba 64]
Hg ²⁰⁰	8,04	0,37	0	0	2	0	[Ba 64]

cióból származó protonok szögeloszlásának mérése stb.) között a szögkorrelációs módszer kedvező helyet foglal el. Megjegyezzük, hogy a (d, p)-reakcióknál keletkező protonok szögeloszlásából tulajdonképpen a befogott neutron pályamomentumát (l) kapjuk meg; a kérdéses nívó teljes impulzusmomentuma, azaz a nívóspin, e pályamomentumnak és a neutron spinjének összege vagy különbsége. Ennek megfelelően egy alternatívát kapunk a lehetséges spinértékekre és a két érték közötti döntés szögkorreláció-méréssel történhet. Más oldalról a szögkorrelációval történő spinmeghatározást nagyon megkönnyíti, ha csak két lehetséges érték között kell választani, ezért a szögkorrelációs spinmeghatározás gyakran támaszkodik a (d, p)-reakció tanulmányozása által szolgáltatott eredményekre.

V.

Nívóélettartam-mérés

Az (n , gamma)-reakció után gerjesztve visszamaradt mag rendelkezhet egy vagy néhány olyan nívóval, amelynek az élettartama a mai kísérleti technikával mérhető. Ezen nívók között vannak olyanok, amelyek más módon (pl. béta-bomlással) nem gerjeszthetők és ilyenkor az (n , gamma)-reakcióval való gerjesztés az egyetlen lehetőség a nívó élettartamának meghatározására.

A termikus neutron befogás után kialakult, szekundumnál nagyobb élettartamú nívók vizsgálatával nem foglalkozunk. A msec tartományba eső nívók élettartamának vizsgálatával rossendorfi szerzők foglalkoztak [Al60, Al63], a nanoszekundumos tartomány területén pedig *D'Angelo* [An60], valamint *Du Toit* és *L. M. Bollinger* [To61] munkásságát kell megemlíteni.

1. Milliszekundumos élettartamok

A rossendorfi szerzők jól bevált metodikát dolgoztak ki az (n , gamma)-reakciót követő izomér-állapotok élettartamának mérésére. Neutronforrásként termikus reaktort használtak. Mivel ez folyamatosan szolgáltatja a neutronokat, mechanikus szagatóval gondoskodtak neutroncsomagok létrejöttéről. Egy 40 cm hosszúságú, mintegy 10 cm átmérőjű Ni—Cu ötvözetből álló hengert forgattak maximálisan 10^4 /min fordulatszámmal a reaktor egyik horizontális csatornájának a kimeneténél. A rotor palástjába két vájat van bemarva. A rotor egy fordulata közben kétszer kapnak a neutronok szabad utat. Ezt a két periódust használják fel a target aktiválására. A másik két periódusban, amikor a neutronok útja el van zárva, az előző periódusban felaktivált magoktól származó gammasugárzás energiáját és időeloszlását mérik. Mind az aktiválási, mind a mérési periódusok egyikét a háttér meghatározására használják fel oly módon, hogy a rotor megfelelő szegmensei kadmiummal vannak borítva és a termikus neutronokat elnyelik, míg az egyéb háttért jelentő komponenseket átengedik. Mind az energia- mind az időmérés többszörös csatornás berendezéssel történik. A többszörös csatornás időmérő-berendezés egyes csatornáinak megfelelő időintervallum beállítása a rotor meghatározott helyzetéhez szinkronizáltan történik.

Ezzel a metodikával meg tudták határozni az átmenetek energiáját, az izomér-nívó élettartamát és az aktivációs hatáskeresztmetszetet (a B^{10} hatáskeresztmetsze-

tével való összehasonlítás alapján). Néhány esetben meg tudták határozni egy-egy átmenetre vonatkozóan a belső konverziós együtthatót oly módon, hogy a kérdéses átmenetnek megfelelő fotocsúcs és röntgencsúcs alatti területeket összehasonlították. Módszerük élettartam mérésre a 10^{-4} sec-től néhány sec-ig terjedő tartományban használható.

Mérési eredményeik a IV. táblázatban találhatók.

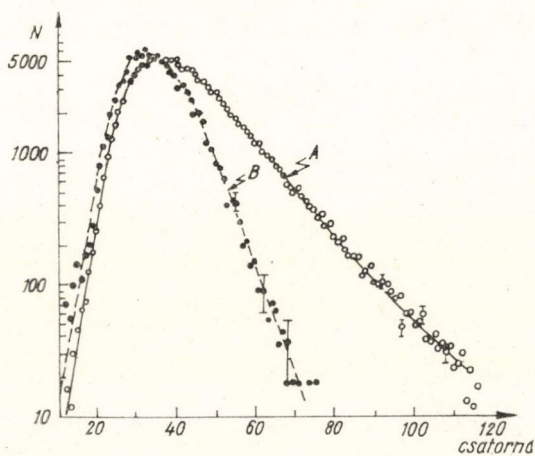
IV. TÁBLÁZAT

Reakció	$T_{1/2}$	σ_{act} barn
$\text{Na}^{23}(n, \text{gamma})\text{Na}^{24m}$	$20,3 \pm 0,2$ msec	$0,40 \pm 0,03$ [A163]
$\text{Ge}^{70}(n, \text{gamma})\text{Ge}^{71m}$	$20,0 \pm 0,6$ msec	$0,28 \pm 0,07$ [A163]
$\text{Ga}^{71}(n, \text{gamma})\text{Ga}^{72m}$	36 ± 1 msec	$0,15 \pm 0,05$ [A163]
$\text{Se}^{76}(n, \text{gamma})\text{Se}^{77m}$	$17,7 \pm 0,03$ sec	22 ± 3 [A163]
$\text{In}^{115}(n, \text{gamma})\text{In}^{116m}$	$2,16 \pm 0,02$ sec	92 ± 14 [A163]
$\text{Er}^{166}(n, \text{gamma})\text{Er}^{167m}$	$2,27 \pm 0,05$ sec	15 ± 2 [A163]
$\text{Yb}^{174}(n, \text{gamma})\text{Yb}^{175m}$	67 ± 1 msec	46 ± 4 [A163]
$\text{Hf}^{177}(n, \text{gamma})\text{Hf}^{178m}$	$4,3$ sec	$1,4 \pm 0,6$ [A162]
	$18,6$ sec	50 ± 15

2. Nanoszekundumos élettartamok

A mérések késleltetett koincidencia módszerrel történtek. Az egyik detektor a nagyenergiájú gammasugárzást, a másik a hozzá tartozó lágy gammasugárzást detektálta. Időfelbontás szempontjából kívánatos lenne, ha mind a két detektor plasztik szcintillátort tartalmazna, amelynek a felvillanási ideje nagyon rövid.

A nagyenergiájú detektor valóban plasztik szcintillátorból állt, azonban a lágy gamma regisztrálásra szolgáló szcintillátornak vékony, 6 mm vastagságú NaJ kristályt használtak, mivel ebben kevésbé komplikálja a lágy gamma kiválasztását a nagyobb energiájú gammasugarak okozta Compton-háttér.



17. ábra. A Rh^{104} 51 keV-es gammaátmenetének bomlási görbéje (A). B — a prompt időfelbontási görbe [To61]

A $t=0$ időpont kijelölése a nagyenergiájú gamma-kvantum segítségével történt. Mérési eredményeiket az V. táblázat tartalmazza. Példaként a 17. ábrán bemutatjuk a Rh^{104} 51 keV-es gamma-átmenetének bomlási görbéjét (A). Összehasonlításként láthatjuk a prompt időfelbontás görbét is (B).

A nanoszekundumos élettartam mérés területén szemmel láthatóan kevés eredmény született és további vizsgálatok volnának kívánatosak, annál is inkább, mert sok esetben

az izomér-nívók megkeresése és élettartamuk meghatározása szükséges előfeltétele további, más jellegű vizsgálatoknak.

Itt említjük meg, hogy az utóbbi években széles körű kísérleti munka indult meg gerjesztett nívók mágneses momentumának, illetve g -faktorának meghatározása érdekében (l. pl. [Bo 62, Ka 64]). Ezek a vizsgálatok ez ideig radioaktív preparátumok ill. az utóbbi időben töltött részcseke által kiváltott magreakciók esetében történtek, és a magfizikai cél mellett jelentős szilárdtestfizikai érdekességgel is bírnak. Tudomásunk szerint nem alkalmazták azonban ez ideig ezt a metodikát (n , gamma)-reakciók során gerjesztett nívók mágneses momentumának meghatározására, — bár ennek semmi elvi akadálya nincs. Valószínű azonban, hogy komoly kísérleti nehézségek (pl. háttér) merülnek fel.

V. TÁBLÁZAT
[To 61]

Gerjesztett mag	Nívóenergia (keV)	Nívóélettartam (nsec)
Mn ⁵⁶	25	11,4 ± 3
	118	5,1 ± 0,5
Rh ¹⁰⁴	51	2,6 ± 0,2
Cu ⁶⁴	159	≤ 0,3
	275	≤ 0,3
Al ²⁸	32	2,3 ± 0,2
J ¹²⁸	30	8,8 ± 1,0
	137	8,0 ± 0,6

VI.

Polarizációs vizsgálatok

Polarizált neutronok befogódása után a keletkezett mag bizonyos mértékig orientálva lesz. Az orientáció mértéke függ a neutronok polarizációjának fokától és a befogási nívó spinjétől. A befogási nívóról kiinduló gammakaszkaád által érintett nívók is orientáltak maradnak, ha a befogási nívó orientálva volt, csak csökkent mértékben (l. pl. [Lo 65]).

Könnyen elképzelhető lenne, hogy az orientált mag által kibocsátott gamma-sugárzás a polarizáció irányához képest anizotróp szögeloszlást mutat. A valóságban azonban nem ez a helyzet: a szögkorreláció általános elméletéből következik, hogy nem lehet anizotróp szögeloszlást várni olyan reakcióknál, ahol a bombázó részecske által átadott impulzuszórántum az $\frac{1}{2}$ -et nem haladja meg (termikus neutron befogásnál ez az eset áll fenn).

Ezzel szemben elméletileg megmutatták, hogy a polarizált neutronbefogás után kibocsátott gammakvantum cirkuláris polarizációt kell, hogy mutasson [Bi 51]. A cirkuláris polarizáció mértéke (P_γ) függ a neutronok polarizációjának fokától P_n , a kibocsátás szögétől Θ (a neutronpolarizáció irányához mérve), továbbá egy R faktortól, amely magfizikai jellemzőket tartalmaz:

$$P_\gamma = P_n R \cos \Theta,$$

$$R = \frac{2(J - J_0)}{2J_0 + 1} \frac{L(L + 1) + J(J + 1) - J'(J' + 1)}{L(L + 1)}, \quad (11)$$

ahol J_0 , J és J' rendre a targetmag, a befogási nívó és a végnívó spinjei, L pedig a sugárzás multipolaritása. Ha ismerjük a neutron polarizációjának fokát és megmérjük adott szög mellett a befogási állapotból kiinduló gammaátmenet cirkuláris

polarizációját, akkor meghatározhatjuk R értékét. Ha az R kifejezésében szereplő spinek és multipolaritás értékek közül egy kivételével a többi ismert, akkor ily módon az ismeretlen paramétert meghatározhatjuk.

Polarizált neutronok előállításának módszerei az irodalomban ismeretesek (l. pl. [Lo65]). A gammasugárzás cirkuláris polarizációjának meghatározására felhasználhatjuk azt a tényt, hogy a Compton-szórás hatáskeresztmetszete függ a gammasugárzás cirkuláris polarizációjának értékétől (p_f):

$$\sigma^\pm = \sigma^\circ \pm p_e p_f \sigma^p, \quad (12)$$

ahol σ° — a szokásos hatáskeresztmetszet polarizálatlan fotonokra,

σ^p — a hatáskeresztmetszet polarizációtól függő komponense,

p_f — a foton polarizációjának foka,

p_e — az elektron polarizációjának foka.

A + és – előjel attól függ, hogy az elektron és a foton spinje párhuzamos vagy antiparalell.

A fentiekből következik, hogy a cirkuláris polarizáció mérése érdekében a gammasugárzást orientált elektronokat tartalmazó anyagban Compton-szórás alá kell vetni és azután az elektron orientációját ellenkezőjére változtatni. A két esetben mért beütés számok relatív különbsége adja a cirkuláris polarizáció fokát:

$$P_\gamma \sim \frac{N^{++} - N^{--}}{N^{++} + N^{--}}.$$

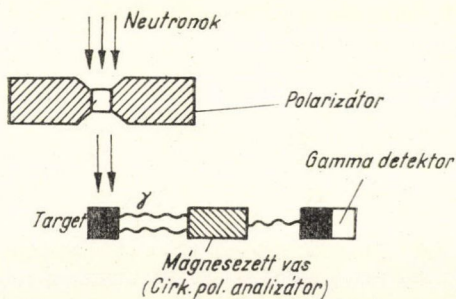
Az elektronok orientálására ferromágneses anyagok mágnesezése ad lehetőséget. Sajnos azonban a vas-atom nem minden elektronja polarizálható ily módon,

hanem csak a 3d héj elektronjai. A vas 26 elektronja közül átlagban mindössze 2,1 orientálható mágnesezéssel és ily módon (12) polarizációs formulánk vason való szórásra alkalmazva praktikusán a következő alakot ölti:

$$\sigma^\pm = \sigma^\circ \pm 0,073 p_f \sigma^p.$$

A fenti elvek alapján először Trumpy végzett (n, γ)-reakciónál cirkuláris polarizáció mérést 1956-ban [Tr 56]. A mérési berendezés sémája látható a 18. ábrán. A későbbiek során Vervier [Ve61] végzett hasonló méréseket tökéletesített

módszerrel: Trumpyval ellentétben egyrészt nem transzmissziós, hanem Fe—Co kristályon fellépő Bragg reflexiós módszert (l. pl. [Lo65]) használt a neutronok polarizálására, másrészt a polarizált neutronokat radiofrekvenciás téren vezette át és ezzel érte el a spinorientáció megváltozását, nem pedig a mágneses tér irányának megfordításával. Ez utóbbi technikailag kedvezőbb, mivel a mágneses tér irányának megváltoztatása hatással van a szcintillációs számláló működésére.



18. ábra. Cirkuláris polarizáció mérésére szolgáló berendezés sémája [Tr 56]

Cirkuláris polarizáció mérésével foglalkozott *Mihalec* és *Ruskov* [Mi62] is. A cirkuláris polarizáció mérése egy új lehetőséget nyújt gerjesztett nivók spinjének meghatározására. Az ezzel a módszerrel meghatározott spinértékek a VI. táblázatban találhatók. Megjegyezzük, hogy a módszer elsősorban befogási nivók spinjének meghatározására alkalmas, mivel a szcintillációs spektrum komplex volta miatt csak a spektrum nagyenergiájú részében található jól definiált csúcsokat lehet felhasználni. Az ilyen jellegű méréseknél a cirkuláris polarizáció fokát megadó relatív beütésszám különbség nagyon kicsi, pl. *Trumpy* mérésében

$$\frac{N^{++} - N^{+-}}{N^{++} + N^{+-}} = 0,0041R.$$

A beütésszám kicsi volta a megfelelő statisztikus pontosság eléréséhez hosszú mérési időt kíván és ez a stabilitással szemben nagy követelményeket támaszt. Annak érdekében, hogy a mérőberendezés elkerülhetetlen instabilitása minél kevésbé befolyásolja a mérési eredményeket, célszerű rövid periódusokban változtatni a mágneses tér irányát (*Trumpy* és *Mihalec*), vagy a neutronpolarizáció irányát (*Verrier*).

VI. TÁBLÁZAT

Vasmag	Energia, MeV		J		
	Befogási állapot	Végállapot	Befogási állapot	Végállapot	
N ¹⁵	10,85	0	(1/2), (3/2)	1/2	[Ve61]
Al ²⁸	7,72	0	(2), (3)	3	[Ve61]
S ³³	8,66	3,22	1/2	3/2	[Tr56, Ve61]
S ³³	8,66	5,71	1/2	1/2	[Ab66]
S ³³	8,66	4,21	1/2	3/2	[Ab66]
Ca ⁴¹	8,40	1,95	1/2	3/2	[Tr56]
Ti ⁴⁹	8,13	1,72	1/2	1/2	[Tr56, Ve61]
Cr ⁵⁴	9,72	0,83	1	2	[Tr56]
Fe ⁵⁷	7,64	0	1/2	1/2	[Tr56, Mi62]
Ni ⁵⁹	9,00	0	1/2	3/2	[Tr56, Mi62]
Cu ⁶⁴	7,91	0,60	1	3	[Ve61]
Cu ⁶⁴	7,91	0,28	1	2	[Ve61]
Cu ⁶⁴	7,91	0	1	1	[Ve61]
Zn ⁶⁵	7,88	0	1/2	3/2	[Tr56]
Y ⁹⁰	6,85	0,78	1	2	[Ve61]
W ¹⁸³	6,18	0	1/2	1/2	[Tr56]

VII.

Izomér hatáskeresztmetszet-viszonyok mérése

Az előzőekben láttuk, hogy az (*n*, gamma)-reakciók felhasználásával többféle lehetőségünk van gerjesztett nivók spinjének meghatározására. Gyakorlatilag ezek a módszerek csak a befogási nivó, illetve méginkább az alapállapothoz közeleső nivók esetében alkalmasak a spinérték megállapítására. A magasabb gerjesztési energiatartományban — különösen nehézmagoknál — olyan nagy a nivósűrűség, hogy technikailag nem lehetséges egyes konkrét nivók spinjének megállapítása. Éppen a nagy nivósűrűség azonban azt sugallja, hogy azért nyerhetünk valamilyen

információt a spinekre vonatkozóan, ha statisztikusan kezeljük a problémát és lemondva a konkrét spinértékek meghatározásáról, vizsgáljuk pl. a gerjesztett nívók spinszerinti eloszlását.

A statisztikus modell alapján *Bethe* és *Bloch* [Be36, Bl54] a következő formulával adták meg a magasan gerjesztett nívóknak az impulzusmomentum szerinti eloszlását

$$\rho(J) \propto \rho(0)(2J+1) \exp \left\{ -\frac{(J+\frac{1}{2})^2}{2p^2} \right\} \quad (13)$$

ahol $\rho(0)$ — a $J=0$ spinhez tartozó eloszlás, p pedig az eloszlást jellemző paraméter. A $\rho(J)$ függvény menete a 19. ábrán látható különböző p -értékekre. Mivel a J legvalószínűbb értéke

$$J_m \sim p - \frac{1}{2},$$

a p meghatározása egyúttal a magnívók közül legvalószínűbben megvalósuló spinértékről is tájékoztat. A p paraméter elméletileg összefüggésbe hozható a maghőmérséklettel (T) [Mal63]:

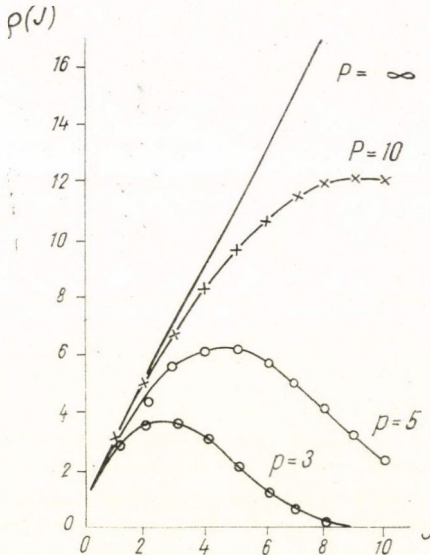
$$p = 8,89 \cdot 10^{-2} aTA^{2/3} \quad (14)$$

ahol A a maradék mag tömegszáma, a pedig $a=0,125 A$. Összefüggést lehet elméletileg megállapítani a p -paraméter és a mag I tehetlenségi nyomatéka között is. A mag tehetlenségi nyomatékának és a merev test tehetlenségi nyomatékának (I_m) a hányadosára a következő formulát kapjuk [Mal63]:

$$\frac{I}{I_m} = 73,1 \cdot p^2 \frac{1}{TA^{5/3}} \quad (15)$$

Ha a p -paraméter értékét kísérletileg módunkban van meghatározni, akkor a fentiek alapján egyértelművé tehetjük a gerjesztett nívók spinszerinti eloszlását, megadhatjuk a keletkezett mag hőmérsékletét és tehetlenségi nyomatékának a merev test tehetlenségi nyomatékához való viszonyát.

A p -paraméter értékének kísérleti meghatározása az ún. izomér hatáskeresztmetszet viszony méréseivel történhet. Gyakran keletkeznek neutronbefogás után (vagy általánosságban más reakcióknál is) olyan magok, amelyek az alapállapothoz közel egy viszonylag hosszú élettartamú metastabil állapottal rendelkeznek. A metastabil állapot és az alapállapot kialakulására vonatkozó hatáskeresztmetszetek hányadosa az izomér hatáskeresztmetszet viszony (σ_m/σ_g). A metastabil állapot metastabilitása azzal függ össze, hogy spinje nagy értékkel különbözik az alapállapot spinjétől és így csak nagy multipolaritású, kis valószínűségű átmenetekkel tud lebomlani, ugyanakkor azonban a metastabil állapot energiája nagyon közel



19. ábra. A gerjesztett magok impulzusmomentum szerinti eloszlásának függése a p -paramétertől

áll az alapállapot energiájához. Éppen ezért e két nível populációjának viszonya jellemző lesz a magreakció impulzusmomentumtól való függésére és a gerjesztett magban uralkodó spinszerinti néveloszlásra. E viszonyok tisztázása érdekében az izomér hatáskeresztmetszet viszonyt érdemes vizsgálni adott bombázó energiánál különböző atommagok esetében, vagy adott magnál változtatva a bombázó részek energiáját, s ezzel a bevitt impulzusmomentumot. Történtek mérések, amelyekben különböző rezonanciákon vizsgálták adott reakció esetében az izomér hatáskeresztmetszet viszonyt; azt tapasztalták, hogy a viszony rezonanciáról rezonanciára változik. Egy harmadik lehetőség, hogy különböző magreakciók révén valósítjuk meg ugyanazt a közbenső magot és végmagot és vizsgáljuk minden esetben az izomér hatáskeresztmetszet viszonyt.

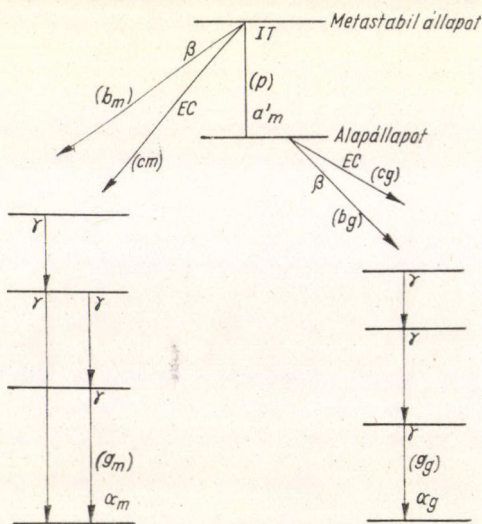
1. Mérési metodika

A mérési feladat az izomér- és alapállapotba vezető folyamatok hatáskeresztmetszet viszonyának, azaz populációs viszonyának meghatározása; meg kell tehát mérnünk egy konkrét reakció és egy konkrét mag esetében, hogy a legerjesztődés során az események hány százalékában végződik a gamma-kaszád az alapállapotban és hány százalékában az izomér állapotban.

A mérésre az ad lehetőséget, hogy sok esetben mind az izomér, mind az alapállapot radioaktív és általában különböző felezési idővel, különböző típusú és energiájú sugárzással bomlik el. A gyakorlatban tehát azonos körülmények között fel kell aktiválnunk a kérdéses mag alap- és izomérállapotát és aktiválás után mérnünk kell az alapállapot és az izomérállapot aktivitásának hányadosát. Közvetlenül nem az aktivitást mérjük, hanem a két állapot bomlására jellemző valamilyen sugárzás intenzitását. A 20. ábrán látunk egy általános bomlási sémát izomér párok esetében.

(Az m és g indexek a metastabil, illetve az alapállapotra vonatkoznak; b , c , p és g rendre a betasugárzás, elektronbefogás, izomérátmenet, illetve a gammaátmenet százalékos aránya a teljes bomlásban, α pedig a belső konverziós együttható.) Az ábrán látható esetben a metastabil és az alapállapot aktivitását mérhetjük a bal oldali, illetve a jobb oldali bomlási séma bármely tagja intenzitásának mérése útján.

Az aktivitásokkal arányos intenzitásokból az aktivitások, azaz a σ_m/σ_g elemi úton kaphatók meg a nívóséma ismeretében: figyelembe kell vennünk a felezési időt, az elágazási arányt, a belső konverziós együtthatót, továbbá a mérőberendezés bizonyos tulajdonságait, pl. a detektorok energiától függő hatásfokát, a sugárzásnak a detektor borításában való abszorpcióját, az analízátor holtidejét, stb.



20. ábra. Általános bomlási séma az izomér párokra

A mérési hibák nagymértékben csökkenthetők, ha ugyanazon a besugárzott mintán ugyanazzal a detektorral mérjük mind az alap-, mind a metastabil-állapot bomlását. A mérés maga a konkrét adottságoknak megfelelően vagy béta-számlálóval, vagy kishátrterű gammadetektorral (pl. szcintillációs számláló egy $1\text{ m} \times 1\text{ m} \times 10\text{ cm}$ méretű, 10 cm falvastagságú ólomházban) történik. A mérési metodika részletes leírása megtalálható az irodalomban (pl. [Bi 61, Za 63]).

Mindkét nívó lebomlásának vizsgálatánál az aktivitás meghatározásához felhasználhatjuk a leánymag valamilyen sugárzását is.

A teljesség kedvéért megemlítjük, hogy ha az izomérpár valamelyike stabil vagy hosszú életű, akkor tömegspektroszkópiai módszerrel lehet a kérdéses nívó keletkezésének hatáskeresztmetszetét meghatározni.

Az irodalomban számos izomér hatáskeresztmetszet viszony mérés ismeretes. Az 1962-vel bezárólag ismeretes mérési adatok megtalálhatók Wing összefoglaló táblázataiban [Wi 62]. Az összeállítás megjelenése óta számos újabb mérés látott napvilágot, köztük magyar szerzők munkái is ([Za 63, Cs 63, KD 64, KD 65]).

2. A σ_m/σ_g elméleti kiszámítása

Az izomér hatáskeresztmetszet viszony elméleti kiszámításának módszerét Huizenga és Vandenbosch dolgozták ki [Hu 60, Va 60]. Módszerük lényegét az alábbiakban foglaljuk össze.

A feladatot két lépésben oldjuk meg: először meghatározzuk annak a valószínűségét, hogy neutronbefogás után valamilyen konkrét J_K spinű állapot valósuljon meg; majd a továbbiakban nyomon követjük a befogási állapotból kiinduló kaszkád és meghatározzuk az alap- és izomérállapot populációjának viszonyát.

Termikus (n , gamma)-reakciók esetén csak kétféle spinű nívóra történhet befogás: $I + \frac{1}{2}$ és $I - \frac{1}{2}$, ha I a targetmag spinje. Általános esetben ha neutron energiája olyan nagy, hogy $l \neq 0$ állapotok is megvalósulhatnak, a J_K impulzusmomentumú közbensőnívó keletkezésének hatáskeresztmetszete [Bi 52]:

$$\sigma(J_K, E_n) = \pi \lambda^2 \sum_{s=|J-s|}^{J+s} \sum_{l=|J_K-s|}^{J_K+s} \frac{2J_K+1}{(2s+1)(2J+1)} T_l(E_n) \quad (16)$$

ahol λ — a beeső neutron de Broglie hullámhossza, s , I és S pedig rendre a neutron-, targetmag- és csatornaspin. A formulában szereplő $T_l(E_n)$ az E_n energiájú és l pályamomentumú neutronra vonatkozó magfelület penetrációs faktor, amelynek az értéke egzaktul számolható [Bi 52].

Egy konkrét J_K spinű befogási állapot megvalósulásának valószínűsége:

$$P_{J_K} = \frac{\sigma(J_K, E_n)}{\sum_{J_K} \sigma(J_K, E_n)} \quad (17)$$

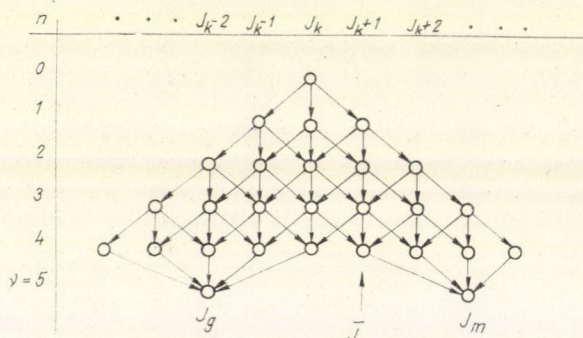
A megvalósult J_K befogási állapotból gammakaszkád indul meg az alap- illetve izomérállapot felé. A kaszkád egyes tagjait jelentő gammaátmenetek valószínűsége általában függ a sugárzás multipolaritásától, a rendelkezésre álló, alkalmas spinnel rendelkező nívók sűrűségétől, az átmenet energiájától és a kezdeti valamint a végállapot szerkezetére utaló redukált mátrixelemektől. Ami a sugárzás multipolaritását illeti, tárgyalásunk során itt is — mint az (n , gamma)-reakciók statisztika-

tikus kezelése során általában — feltételezzük, hogy az átmenetek El jellegűek. (I. II/3) Mivel tárgyalásunk statisztikus jellegű, az átmeneti valószínűség energiától és a redukált mátrix-elemektől való függésétől első közelítésben eltekinthetünk, hiszen a kaszkádok egyes tagjainak energiáit jól lehet közelíteni egy átlagos energiával ($\bar{E} = E_b/\bar{\nu}$), másrészt a sokféle módon megvalósulni képes kaszkádfolyamatokra való tekintettel jó közelítésben számolhatunk a mátrixelemek átlagértékével. A fentiekre való tekintettel lényegében véve az átmeneti valószínűségnek csak a nívósűrűségtől való függésével fogunk foglalkozni.

Annak valószínűsége, hogy a J_K állapotból egyetlen gammakvantum emissziója során J -spinű állapotba jusson a mag:

$$P_{J,1}^{J_K}(p) = \begin{cases} \frac{q_p(J)}{\sum_{J'=J_K-1}^{J_K+1} q_p(J')} & \text{ha } |J - J_K| \leq 1 \\ = 0 & \text{ha } |J - J_K| > 1. \end{cases}$$

A kialakult új állapotokból újabb gamma-emisszió után újabb spinű állapotok érhetők el; az elérés valószínűsége a fenti formula ismételt alkalmazásával kiszámítható. A viszonyok illusztrálására szolgál a 21. ábra és a VII. táblázat. Az n -edik



21. ábra. A J_K befogási állapotból kiinduló dipolkaszkádok által elérhető spineloszlás ν lépés után

szukcesszív dipolátmenet utáni populáció a következőképpen adható meg (figyelembe véve, hogy egy adott J' -spinű és $P_{J',n-1}^{J_K}(p)$ populációjú nívóról ismét háromféle spinű állapotra vezethet csak átmenet):

$$P_{J,n}^{J_K}(p) = q_p(J) \sum_{J'=J-1}^{J+1} \frac{P_{J',n-1}^{J_K}(p)}{\sum_{J''=J'-1}^{J'+1} q_p(J'')}.$$

A kaszkádfolyamat legutolsó (ν -edik) lépcsője már nem szükségszerűen El átmenet, mivel most már meghatározott spinű végállapotok léteznek: ti. az izomér és az alapállapot. Minden egyes konkrét mag esetében meg tudunk adni egy olyan — az izomér és alapállapot spinje között fekvő — spinértéket (\bar{J}), amelyről plauzi-

VII. TÁBLÁZAT

$$P_{J,n}^{(3)}(p)$$

$P_{J,n}^{(3)}(p)$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
--------------------	---	---	---	---	---	---	---	---	---

$$p=3$$

1			0,35334	0,35446	0,29219				
2		0,09619	0,25362	0,37605	0,20383	0,07031			
3	0,01324	0,10458	0,27244	0,31057	0,21288	0,07223	0,01407		
4	0,01439	0,12603	0,26027	0,29799	0,19775	0,08234	0,01888	0,00235	
5	0,01734	0,13180	0,26198	0,28280	0,19363	0,08452	0,02374	0,00385	0,00033

$$p=4$$

1			0,30084	0,34918	0,34998				
2		0,07201	0,21095	0,36563	0,24327	0,10815			
3	0,00904	0,07598	0,22174	0,29782	0,25340	0,11206	0,02996		
4	0,00954	0,08900	0,20720	0,28204	0,23467	0,12892	0,04111	0,00750	
5	0,01118	0,09063	0,20412	0,26413	0,22911	0,13350	0,05285	0,01277	0,00170

$$p=5$$

1			0,27762	0,34471	0,37767				
2		0,06240	0,19171	0,35636	0,25982	0,12972			
3	0,00750	0,06472	0,19850	0,28656	0,26802	0,13353	0,04117		
4	0,00778	0,07455	0,18271	0,26798	0,24578	0,15267	0,05637	0,01218	
5	0,00896	0,07469	0,17733	0,24783	0,23766	0,15710	0,07228	0,02077	0,00338

$$p=6$$

1			0,26527	0,34167	0,39306				
2		0,05757	0,18141	0,35014	0,26830	0,14257			
3	0,00676	0,05909	0,18605	0,27910	0,27468	0,14581	0,04850		
4	0,00694	0,06738	0,16962	0,25877	0,24997	0,16567	0,06604	0,01562	
5	0,00791	0,06683	0,16308	0,23725	0,23989	0,16940	0,08430	0,02655	0,00479

bilis feltételezni, hogy a kaszkád legutolsó lépcsőjében az ennél nagyobb spinű nivókról csak az egyik, az ennél alacsonyabb spinűekről pedig csak a másik végállapotba vezet jelentős valószínűséggel átmenet. Végeredményben tehát annak a valószínűsége, hogy J_K befogási állapotból v számú lépéssel az izomér illetve alapállapotba jusson el a mag a legerjesztődés során:

$$P_{m,v}^{J_K}(p) = \sum_{J=J}^{\infty} P_{J,v}^{J_K}(p),$$

illetve

$$P_{g,v}^{J_K}(p) = \sum_{J=0}^J P_{J,v}^{J_K}(p)$$

Ha tekintettel leszünk arra is, hogy a befogás során különböző spinű nivók valósulhatnak meg, akkor a fenti értékeket meg kell szoroznunk a konkrét befogási

spin megvalósulásának valószínűségével (P_{J_K}) és összegeznünk kell az összes lehetséges J_K -értékekre:

$$\left(\frac{\sigma_m}{\sigma_g}\right)_{\text{elm}} = \frac{\sum_{J_K} P_{J_K} P_{m,v}^{J_K}(p)}{\sum_{J_K} P_{J_K} P_{g,v}^{J_K}(p)}. \quad (18)$$

Az izomér hatáskeresztmetszet viszonyra kapott kifejezésünk mint paramétert tartalmazza a gerjesztett nívók spinszerinti eloszlását jellemző p -t és az átlag-multiplicitást (\bar{v}). A mért σ_m/σ_g értékeknek a számolttal való összevetése oly módon történik, hogy felrajzoljuk az elméleti $(\sigma_m/\sigma_g)_{\text{elm}}$ értékeket az eloszlást jellemző p -paraméter függvényében. Az ábrába berajzolva a mért értéket hibahatárral együtt, konkrét esetben elvben meg tudjuk adni azt a p -értéket, amely a mérési eredményünkkel összefér. Általában azonban a kiértékelést nagyon megnehezíti, hogy a különböző \bar{v} értékeknek megfelelően egy görbesereget kapunk. Mivel \bar{v} értéke általában nem ismert, sok esetben nem tudjuk a p -értékét elfogadhatóan szűk tartományra korlátozni. Éppen ezért alapvető jelentőségű lenne az átlag multiplicitást meghatározni olyan magok esetében, amelyeknél az izomér hatáskeresztmetszet viszonyt mérjük. Mint már a III/3. fejezetben említettük, ez a probléma, amelynek a megoldása ismét aktuálissá tette a multiplicitás mérést. Ez ideig az izomér hatáskeresztmetszet viszony kiértékelések egyértelművé tétele céljából multiplicitás mérések még nem történtek.

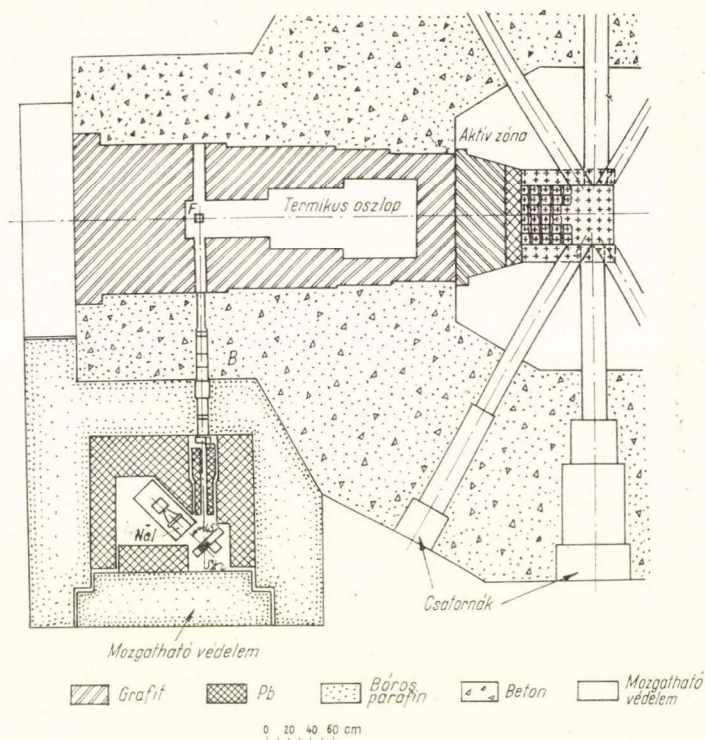
VIII.

(n , gamma)-reakciókból származó gammasugarak rezonancia szóródása

Az (n , gamma)-reakciókból származó gammasugarak kiinduló pontjai, illetve eszközei lehetnek egyéb magfizikai vizsgálatoknak. Gammasugaraknak magspektroszkópiai célra való felhasználásánál gammaforrásként szoktak használni radioaktív preparátumokat, töltött részek által kiváltott magreakciókat és fékezési sugárzást. Az (n , gamma)-reakciókból nyerhető gammasugarak felhasználása e területen sok előnnyel kecsegtet: a spektrum vonalas (szemben a fékezési sugárzás folytonos spektrumával), a gammaenergia 6–10 MeV nagyságrendű (szemben a radioaktív preparátumokkal) és az elérhető intenzitásviszonyok kedvezők (szemben a radioaktív preparátumokkal és töltötttrész magreakciókkal). Az utóbbi években kezdtek meg a neutronbefogásból származó gammasugarak felhasználását a magfizika több területén. Egyik ilyen terület a magfoto-effektus, amellyel itt nem szeretnénk részletesen foglalkozni; ehelyett hivatkozunk az irodalomra [We61, G63, G64].

Szeretnénk ugyanakkor egy rövid áttekintést adni az (n , gamma)-reakciókból származó gamma-sugarak rezonanciaszóródásával kapcsolatos vizsgálatokról, amelyek új szint jelenetnek az (n , gamma)-reakciók felhasználásában és sok vonatkozásban érdekesnek, perspektivikusnak ígérkeznek. Kisenergiájú gammasugárzások rezonancia-szóródása már régóta ismeretes és az utóbbi időben a Mössbauer-effektus révén különösen ismertté vált. A nagyenergiájú gammasugarak rezonancia-szóródása az előbbiektől kiegészítésképpen lehetővé teszi magasan gerjesztett, a befogási energia körüli nívók tanulmányozását.

E vizsgálatok kezdeményezése a Rehovoth-i csoport nevéhez fűződik és azóta is



22. ábra. (n , gamma)-reakciókból származó gammasugarak rezonancia szóródásának vizsgálatára szolgáló mérési elrendezés [Ar64c]

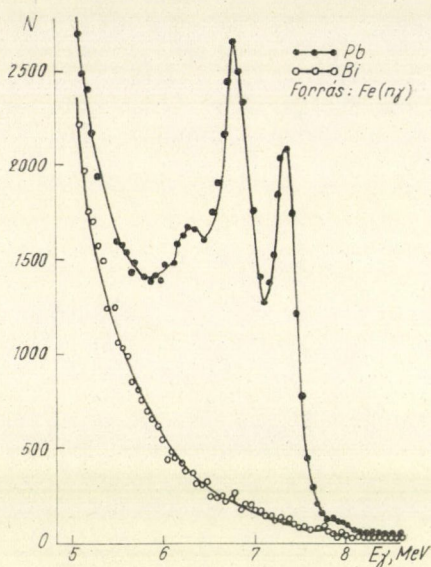
ők bizonyulnak e terület legaktívabb művelőinek [Ar63, Ar64a, Ar64b, Ar64c, Ben62, Ben63]. Mérési berendezésük a 22. ábrán látható [Ar64c]. A gammaforrásként szolgáló targetet (F) egy reaktor termikus oszlopában helyezték el. Az ebből kiinduló gammasugárzás a neutronnyaláb irányára merőlegesen (kis háttér!) megfelelő kollimátorrendszeren és neutron elnyelő abszorbensen (B) keresztül jut el egy ólomházban elhelyezett szóróanyagra (Sz). A szóróanyagon rezonanciaszóródást szenvedett gammasugarak szcintillációs detektorra, majd sokcsatornás analizátorra jutnak. Tipikus mérési eredmény látható a 23. ábrán, ahol az $Fe(n, \text{gamma})$ -reakcióból származó és Pb illetve Bi szóróközegen szóródott gammasugarak spektruma látható. A Bi -spektruma láthatóan folytonos, ugyanakkor a Pb -on a gammasugarak rezonanciaszóródást szenvednek. A VIII. táblázatban foglaltunk össze néhány, általuk gammaforrásként használt magot, amelyen végbemenő (n , gamma)-reakció legfontosabb nagyenergiájú gammavonalai a táblázat utolsó oszlopában vannak feltüntetve.

A mérés alapja, hogy a targetre eső gammaspektrum nagyenergiájú részében levő gammasugarak energiája szerencsés esetben egybeesik a szórómag valamelyik gerjesztett nivójával és ily módon rezonancia szórás léphet fel. Tulajdonképpen nem szigorú egybeesésről van szó, hanem a végelességű nivó és a végelességű

gammavonal valamilyen mértékű fedéséről. Még az ilyen értelemben vett egybeesés valószínűsége is úgy tűnik, hogy kicsi; azonban a gyakorlatban 50-féle szóró-közeg esetében kb. 50 rezonanciát sikerült észlelni. Hasonló jellegű vizsgálatokat kezdett és hasonló eredményekről számol be Sciuti csoportja is [Sc 65].

Nilvánvaló, hogy a fenti módszerrel nyert eredmények sok szempontból csak kvalitatív jellegűek. Kíváncos volna az ismeretlen mértékű átfedésből származó rezonancia-szóródás egyszerű ténye helyett megadni a rezonancia-energia pontos értékét, a rezonáló magnívó szélességét és az átfedés mértékéül szolgáló nívóenergia-gammaenergia távolságot (δ). Hogy ezekre a kérdésekre választ kaphassunk valamilyen módon változtatnunk kell a gammasugárzás energiáját. Kismérvű változtatás is elegendő, mert általában a befogási energiához képest kis energiaváltoztatással módunkban van letapogatni a mérendő nívót.

A gamma-energia kismértékű változtatására három lehetőséget találtak. Ha változtatjuk akár a gammaforrás, akár a szóróközeg hőmérsékletét, a nívószélességek Doppler-effektus okozta ismert mértékű kiszélesedése tulajdonképpen közvetve bizonyos értelemben a gammaenergia változtatásának felel meg: az átfedés ismert törvényszerűség szerint változik. Egy másik lehetőség, hogy epitermikus neutronokat használunk fel, amelyek energiáját repülési idő módszerrel mérjük; különböző energiájú neutronok befogódása esetén más és más lesz a gamma-emisszió során visszalökött mag energiája és így a gammaenergia is. Kedvezőbb intenzitási viszonyokat kapunk, ha mozgat-



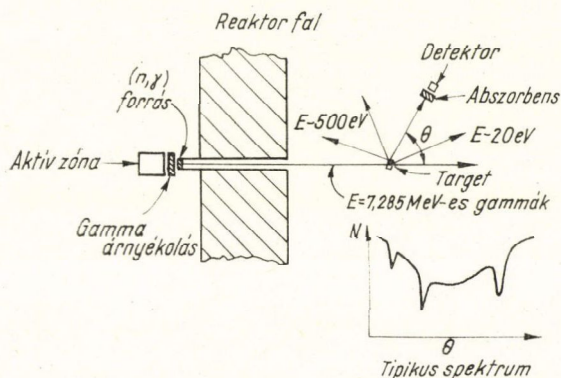
23. ábra. Fe(n, gamma)-reakcióból származó gammasugárzás rezonancia szóródása Pb-on [Ar 64c]

VIII. TÁBLÁZAT

Forrás	Kémiai összetétel	E_γ							
Al	Fém	7,73							
Cl	Polivinilklorid	8,55	7,78	7,41	6,96	6,64	6,12	5,72	
Co	CoO	7,49	7,20	6,98	6,87	6,68	6,48	5,97	5,67
Cr	Fémpor	9,72	8,88	8,49	7,93	7,09	6,65	5,60	
Cu	Fém	7,91	7,63	7,29	7,14	7,00	6,63		
Fe	Fémpor	9,30	7,64	7,28	6,03				
Hg	$\text{Hg}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	6,44	6,31	5,99	5,67	5,44			
Mn	MnO_2	7,26	7,15	7,04	6,96	6,79	6,10	5,76	
Ni	Fém	9,00	8,50	8,10	7,83	7,58	6,84	6,64	
Ti	TiO_2	6,75	6,56	6,42					
V	V_2O_5	7,30	7,16	6,86	6,51	6,46	5,87	5,73	
Y	Y_2O_3	6,07	5,63						

juk a forrást vagy a szóróközeget: a fellépő Doppler-effektus megváltoztatja a relatív gammaenergiát. A mozgás történhet oly módon, hogy egy forgó korongra helyezzük el pl. a forrást; a fordulatszám változtatásával változtathatjuk a Doppler-effektust és így a gammaenergiát. Sőt a forgás irányának megváltoztatásával módunkban van mindkét irányba változtatni a gammaenergiát. Tájékozódásképpen megjegyezzük, hogy ha a target forgatásának kerületi sebessége 600 m/sec, akkor 15–20 eV nagyságrendű eltolódás érhető el. Rotortechnikát alkalmazott pl. a Rehovoth-i csoport; a hőmérsékletet változtatta Fleischmann és bizonyos méréseiben ugyancsak a Rehovoth-i csoport. Mérési eredményeiket illetően az irodalomra utalunk [Bn62, Bn63, Fl63, Ar63, Ar64a, Ar64b, Ar64c, Y63].

A gammasugarak energiájának változtatására az előbbieken felsorolt, klaszikusnak nevezhető módszerek mellett egy igen érdekes új javaslatról olvashattunk nemrég az irodalomban [In65]. A szerzők $\text{Fe}(n, \text{gamma})$ -reakcióból származó gammasugarakat Pb szórótargetre ejtettek. A Pb-magokon rezonancia szóródást szenvednek a gammasugarak és különböző szögek alatt különböző energiájú szóródott gammakvantumokat kapunk; az energia szögfüggését a Compton-formula írja le (m_e helyébe m_{Pb} kerül). 7 MeV körüli gammasugarak esetén a szögnek mintegy 180°-os változtatásával kb. 550 eV-os tartományban tudjuk a gammaenergiát változtatni. Mivel ezt az energiát a befogási energiához, azaz 7 MeV-hez kell viszonyítani, igen pontos relatív energia változtatásra van módunk. A mérési berendezés vázlata a 24. ábrán látható. Az ábrán a szerzők feltüntették egy várható tipikus



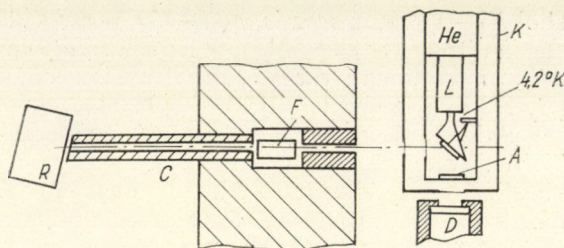
24. ábra. McIntyre és Randall mérési elrendezése és a várható „tipikus” spektrum [In65]

kus spektrumot a szög függvényében, amelyet oly módon kaphatunk, hogy valamilyen magból egy abszorbenst helyezünk a detektor elé. A detektor szögét változtatva különböző energiájú gammasugarak jutnak az abszorbensre és így módunk van az abszorbensten végbemenő esetleges rezonancia-szóródást észlelni és a rezonancia-görbe alakját pontosan lelapogatni. Hasonlóképpen megkaphatjuk a rezonanciacsúcsok távolságát is.

E fejezet keretében említjük meg, hogy az utóbbi időben felmerült annak a gondolata, hogy (n, gamma) -reakciók által gerjesztett magokon Mössbauer-effektust tanulmányozzanak. Eddig két sikeres vizsgálatról olvashattunk: az egyik [Ha65] $\text{K}^{39}(n, \text{gamma})\text{K}^{40}$ -reakcióban keletkezett K^{40} 29,4 keV-es gerjesztett nivóján végzett Mössbauer-effektus vizsgálatokról számol be, a másik [Fi65] pedig $\text{Gd}^{155}(n, \text{gamma})\text{Gd}^{156}$ és $\text{Gd}^{157}(n, \text{gamma})\text{Gd}^{158}$ reakció során keletkezett Gd^{156} 89,0 keV-es, illetve Gd^{158} 79,5 keV-es nivóján végzett kísérleti munkáról. Illusztrációként a 25. ábrán bemutatjuk a kísérleti berendezés sémáját [Fi65]. Az R reaktorból származó neutronnyaláb C kollimátoron és F szűrőn át (az F a gamma és gyorsneutron háttér csökkentésére szolgáló Bi-egyikristály) jut el a T targetre. A target (azaz a gamma-forrás) mozgatható L

hangszórómembránal történik. A rezonancia szóródott gamma-sugarak A abszorbensen keresztül jutnak a D NaJ detektorra. A targetet héliumot tartalmazó K kriosztát hűti.

Bár az alacsony energiájú, Mössbauer-effektust mutató gamma-sugárzást az (n , gamma)-reakció során nagyenergiájú gamma átmenet előzi meg, az emiatt fellépő visszalökődés csak részben rontja el a visszalökésmentességet és ennek megfelelően észlelhető Mössbauer-effektus. Az a tény, hogy (n , gamma)-reakciók — és más magreakciók — során gerjesztett magokon sikerült Mössbauer-effektust megfigyelni, igen jelentős abból a szempontból, hogy kiszélesedett a Mössbauer-magok száma: olyan magokon is lehet Mössbauer vizsgálatokat végezni, amelyek radioaktív bomlás útján nem gerjeszthetők.



25. ábra. MÉRŐBERENDEZÉS (n , gamma)-reakció útján gerjesztett nívók Mössbauer-vizsgálatára. R —reaktor, C —kollimátor, F —szűrő, T —target, L —hangszórómembrán, A —abszorbens, D —detektor és K —kriosztát. [Fi 65]

IX.

Reakciómechanizmus

Az (n , gamma)-reakcióknál, ha a bombázó neutron energiája — mint esetünkben — a termikus ill. az epitermikus tartományba esik, joggal feltételezhetjük, hogy a neutronbefogás után egy aránylag hosszú életű közbenső mag alakul ki és az gerjesztődik le a későbbiek során egy vagy több gammakvantum kibocsátásával. A közbenső magon keresztül történő reakciómechanizmus szerint a hatáskeresztmetszetet a jól ismert Breit—Wigner-formula írja le; ha csak egy rezonancia van a közelben:

$$\sigma_{n,\gamma} = \pi g \lambda_0 \lambda \frac{\Gamma_n \Gamma_\gamma}{(E - E_0)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (19)$$

ahol E a bombázó energia, E_0 a legközelebbi rezonanciaenergia, Γ , Γ_n és Γ_γ pedig rendre a teljes nívószélesség, a neutronszélesség, illetve a gammaszélesség; λ — a neutron hullámhossza, λ_0 — a rezonancia energiának megfelelő hullámhossz.* E formula alapján konkrét esetekben kiszámolhatjuk a várható hatáskeresztmetszetet, ha egyéb mérésekből ismertek a formulában szereplő Γ -értékek.

A közbenső mag feltételezésével statisztikus alapon kiszámolhatjuk a gamma-spektrum alakját is, mint azt a II/3. fejezetben tettük. Emlékeztetünk a spektrum alakjának levezetésénél alkalmazott lényeges feltételezésünkre, mely szerint El sugárzás esetén az átmeneti valószínűség:

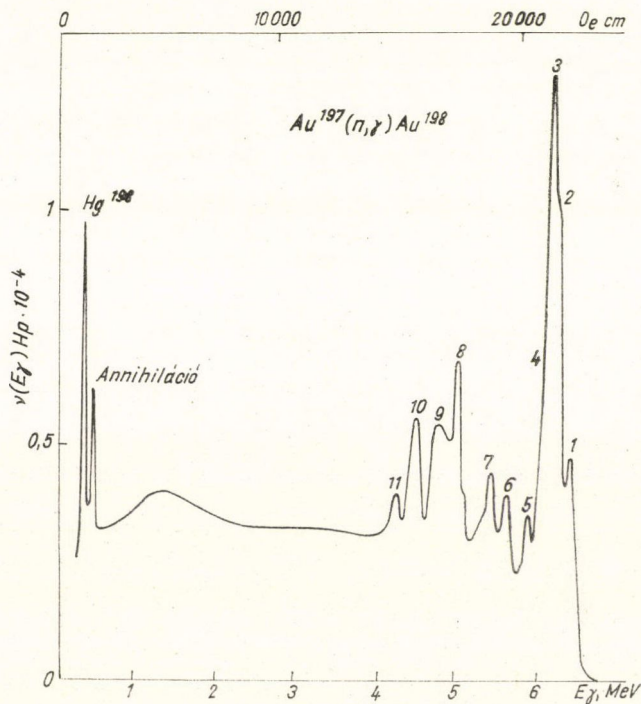
$$w(E, E_\gamma) \sim E_\gamma^3 Q(E - E_\gamma),$$

* g — a spinektől függő statisztikus súlyfaktor.

ahol E — a gammaenergia, $\varrho(E - E_\gamma)$ — a végállapot körüli nívósűrűség. E formula alapján kvalitatív elképzelésünk lehet a spektrum durva alakját illetően: a spektrum közepén maximum várható, mivel a kisenergiájú átmenetek is kisvalószínűségűek (E_γ kicsi), a nagyenergiájúak is (az alapállapot közelében a nívósűrűség kicsi).

A kísérletileg mért hatáskeresztmetszet értékek, valamint a gammaspektrumok kísérletileg észlelt alakja az esetek többségében összhangban van a közbenső mag kialakulásának feltételezésével. Sok esetben azonban eltérések, anomáliák lépnek fel. Így például a hatáskeresztmetszetek számolt és mért értéke sok magnál (különösen a 20—70 és 170—210 tömegtartományban) nagyságrendileg eltér. Ha pedig végiglapozzuk az (n, gamma) -reakcióknál fellépő gammaspektrumokat tartalmazó atlaszokat, akkor sok esetben — elsősorban ugyancsak a fenti tömegszám-tartományban — a spektrum alakja szembeszökően eltér az elméletileg várttól: a spektrum nagyenergiájú végén anomálikusan nagy intenzitású gammavonalak vagy vonalcsoportok láthatók [Gr58c]. Illusztrációként a 26. ábrán bemutatjuk az $\text{Au}^{197}(n, \text{gamma}) \text{Au}^{198}$ spektrumát.

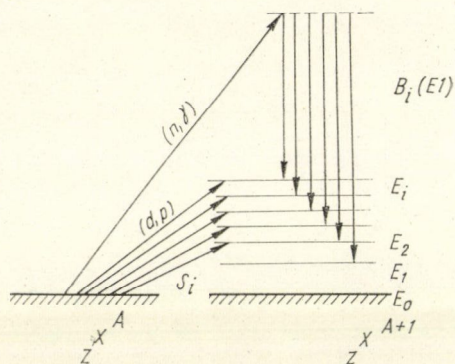
Az anomáliák megmagyarázása a közbenső mag modelltől eltérő reakciómechanizmus feltételezését igényli. Kézenfekvő arra gondolni, hogy az anomáliát mutató esetekben a direkt mechanizmusnak lehet jelentős szerepe. Erre utal pl. a (d, p) - és (n, gamma) -reakciók közötti alábbi analógia (amely túlnő azon az elemi analógián, hogy mindkét reakció esetében a targetmag és végmag azonos és lényegében véve



26. ábra. Az $\text{Au}^{197}(n, \text{gamma}) \text{Au}^{198}$ gammaspektruma [Gr58a]

a reakció eredményeként egy neutron marad a magban): nagyon sok esetben az (n , gamma)-reakciók gammaspektrumában és (d , p)-reakciók proton spektrumában az ugyanazon végmag ugyanazon végállapotára vezető gammasugarak, illetve protonok intenzitása kifejezett korrelációt mutat. A (d , p)-reakciónál viszont — bizonyos energiatartományban a direkt reakciómechanizmusnak közismerten nagy szerepe van. A 27. ábrán mutatjuk be, hogy hogyan gerjeszthetők ugyanazok a nívók (d , p)- és (n , gamma)-reakcióval.

A direkt neutronbefogás úgy képzelhető el, hogy a bombázó s -állapotú neutron „beesik” valamilyen egyrészecske p -állapotba és közben az energiakülönbségnek megfelelő energiájú gammasugárzást bocsát ki, — anélkül, hogy közbelső mag jött volna létre. Ott várható tehát nagy valószínűséggel direktbefogás, ahol az alapállapot közelében egyrészecske p -nívók vannak. Elméleti oldalról — többek között — *Bockelman* [Bo 59] foglalkozott a direktbefogás kérdésével és egyben a (d , p)-reakciókkal való analógiával. A direktbefogás hatáskeresztmetszetére a következő kifejezést adja meg:



27. ábra. Illusztráció ugyanazon végállapotok (n , gamma)- és (d , p)-reakciókkal való gerjesztésére

$$\sigma = 1,11 \left(\frac{Z^2}{A(A+1)} \right) \frac{R}{E_\gamma} |\Phi_i(R)|^2 N^2 (2J+1) 10^{-24} \text{ cm}^2.$$

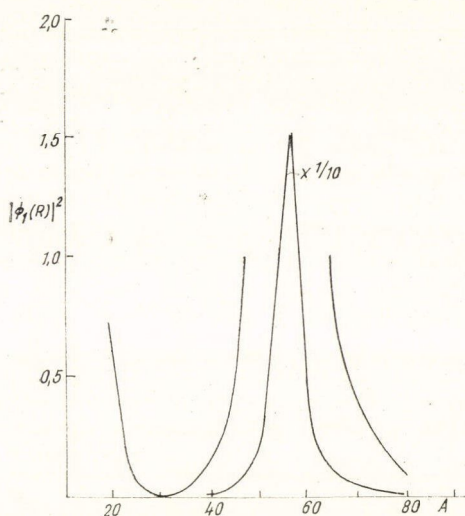
Itt R a mag sugara 10^{-13} cm-ben, E_γ a gammasugárzás energiája MeV-ben, J a végállapot impulzuszómomentuma, $\Phi_i(R)$ a kezdeti állapot hullámfüggvénye a mag felületén. Az N pedig az azonos végállapotra vezető (d , p)-reakció átmeneti mátrixelemével (γ_{dp}) van összefüggésben

$$N^2 = \frac{\gamma_{dp}^2 (2R/\hbar^2)}{1 + \varepsilon \gamma_{dp}^2 (2\mu R/\hbar^2)}; \quad \varepsilon = \frac{Q+2}{2(Q+1)^2}; \quad Q = \left(\frac{2\mu E_\gamma}{\hbar^2} \right)^{1/2} R,$$

ahol μ a redukált tömeg. A $|\Phi_i(R)|^2$ függvény közelítőleg kiszámolható ésszerű paramétereket tartalmazó komplex optikai potenciál segítségével. A 28. ábrán látható *Bockelman* számolása alapján a $|\Phi_i(R)|^2$ függvény alakja.

Lane és Lynn [La 60a, La 60b] az előbbinél sokkal általánosabban, a diszperziós formalizmus felhasználásával tárgyalták elméletileg ugyanezt a problémát. Mind *Bockelman*, mind Lane és Lynn számításának eredményei a kísérleti értékekkel bizonyos esetekben jó nagyságrendi egyezést adtak, más esetekben azonban nagyságrendi eltérések mutatkoztak.

Mindezek alapján arra a következtetésre kell jutnunk, hogy bizonyos esetekben valószínűleg van szerepe a direkt-mechanizmusnak a termikus (n , gamma)-reakcióknál, azonban csak a direkt-mechanizmussal nem lehet megmagyarázni a fellepő anomáliákat.

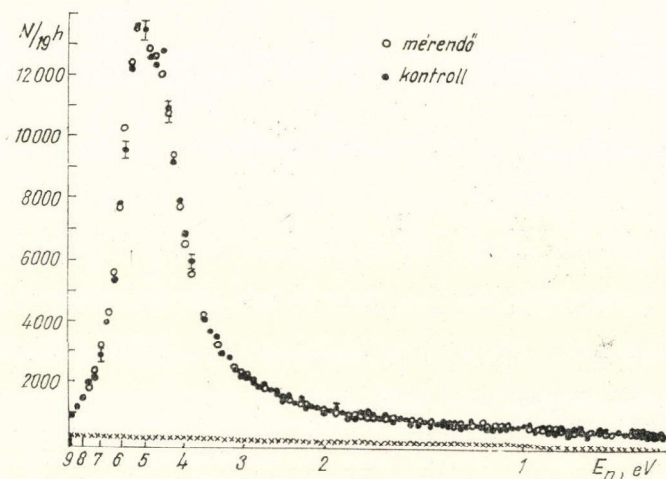


28. ábra. A kezdeti állapot hullámfüggvénye a mag felületén az A tömegszám függvényében, Bockelman számítása alapján

az alapállapothoz közel egyrészesce p -nívók vannak, és így adva van a lehetősége az s -neutronok direkt befogásának. Másrészt az arany (n, γ)-reakciónál fel-lépő gammaspektrumában anomálishan nagy intenzitású gammaátmenetek találhatók, amely anomáliát Lane és Lynn szerint éppen a direkt befogással lehetne magya-rázni. A harmadik szempont, hogy jól izolált erős rezonancia legyen az epitermi-kus tartományban, azaz hogy más rezonanciák zavaró hatását pl. rezonanciák

Kísérletileg elsőnek éppen a szerző és munkatársai mutatták meg, hogy egy konkrét esetben, anomáliát mutató mag-nál a direkt mechanizmus nem, vagy csak elhanyagolható kis mértékben lép fel. A mérés alap gondolata a következő volt. A direkt és rezonancia kölcsönhatás egyi-dejű fennállása esetén várható, hogy köztük interferencia lép fel. Az interferencia-ef-fektus kedvező esetben kísérletileg észlel-hető: az interferencia miatt eltorzulhat a rezonanciagörbe Breit—Wigner-formula alapján várható szimmetrikus alakja. A mérési feladat tehát valamilyen anomális gammaspektrumot mutató mag esetében az epitermikus tartomány egy jól izolált rezonancia görbéjének alakját pontosan megmérni és összehasonlítani a Breit—Wigner-formulából várható alakkal.

Mi a méréseinknél targetmagként Au-t választottunk három okból. Egyrészt az arany abba a tömegtartományba esik, ahol



29. ábra. A rezonancia-görbe alakja az $\text{Au}(n, \gamma)$ -nál keletkező ke-mény (\circ) és lágy (\bullet) γ -sugarakkal mérve

közötti interferencia jelenségeket el lehessen hanyagolni és a rezonancia alakja ily módon a szimmetrikus Breit—Wigner-formulával leírható legyen. Az arany-nál 4,9 eV-nál jól izolált rezonancia van. E rezonancia alakjának szimmetriáját vizsgáltuk.

A mérést a dubnai Egyesített Atomkutató Intézet impulzus reaktorán végeztük. A mérési eredmények tanúsága szerint a mérési hibahatárt meghaladó interferencia nem lép fel (29. ábra) és ezek alapján kijelenthető, hogy e konkrét esetben a fennálló anomáliák nem magyarázhatók számottevő mértékű direkt mechanizmus fellépésével. A direkt befogás hatáskeresztmetszetére felső becslésként 0,5 mb értéket adtunk meg.

A szerző vizsgálatait után mások is végeztek hasonló méréseket [Wa 63, Hu 65] és a szerzővel megegyezően nem kaptak számottevő mértékű interferencia effektust és a direkt befogás hatáskeresztmetszetének felső becslésére a szerző által megadott-hoz közeleső értéket kaptak.

A közelmúltban egy új, jelentős előrelépés történt a reakciómechanizmus kérdésében. Ikegami és Emery [Ik 64] nemrégien megjelent cikkükben összehasonlították néhány mag esetében az ugyanarra a végállapotra vezető (n , gamma)- és (d , p)-reakciók „erősségét” a 40—65 tömegtartományban. (Ez a tartomány különösen alkalmas az összehasonlításra, mivel itt az alapállapothoz közel egyrészcseke p -állapotok vannak, továbbá e tartományban az s -neutron erőfüggvény maximumot mutat.) Ésszerű megfontolások alapján az (n , gamma)-reakciók esetében az erősség mértékéül a befogási állapotból a végállapotba vezető El sugárzás intenzitásával arányos alábbi mennyiséget vették:

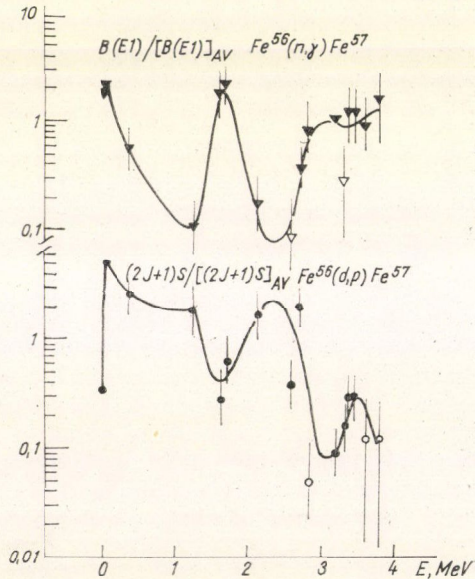
$$\frac{B(E1)}{[B(E1)]_{AV}}; \quad B(E1) \equiv \frac{I_\gamma}{E_\gamma^3},$$

ahol az AV index a kérdéses mennyiség átlagos értékére utal. (d , p)-reakciók esetében az $l=1$ strippingnél az erősség mértékéül az S spektroszkópiai és a statisztikus faktor, $(2J+1)$, szorzatának az átlaghoz viszonyított értékét választották:

$$\frac{(2J+1)S}{[(2+1)S]_{AV}}.$$

A két erősséget a végállapot energiájának függvényében vizsgálták. Példaként a 30. ábrán bemutatjuk az Fe^{56} targetmagra vonatkozó eredményeiket. Analizálva az ábrán látható görbéket a következőket jegyezhetjük meg:

a) Az „erősség” mindkét reakciónál függ a végállapot energiájától és nem konstans, mint az a közbenső mag elképzelés alapján várható lenne.

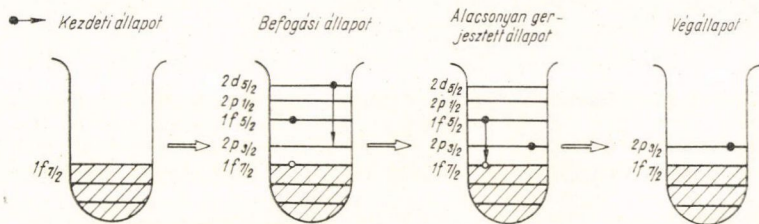


30. ábra. Ugyanazon végállapotra vezető (n , gamma)- és (d , p)-reakciók „erősségének” összehasonlítása Fe^{56} targetmag esetében. Az abszcisszára a végállapot gerjesztési energiája van felmérve [Ik 64]

Ez a tény arra utal, hogy a szóban forgó esetben az (n , gamma)-reakció nem közbelső módon keresztül valósul meg.

b) A görbék kezdeti szakaszán a két görbe között pozitív korreláció áll fenn. Feltehető tehát, hogy ebben a szakaszban a direkt befogásnak van szerepe.

c) Legérdekesebb a két görbének az a szembetűnő tulajdonsága, hogy — a kezdeti szakasztól eltekintve — kifejezett negatív korreláció látható a két reakció erőssége között. Az ehhez a tartományhoz tartozó (n , gamma)-reakciók tehát biz-



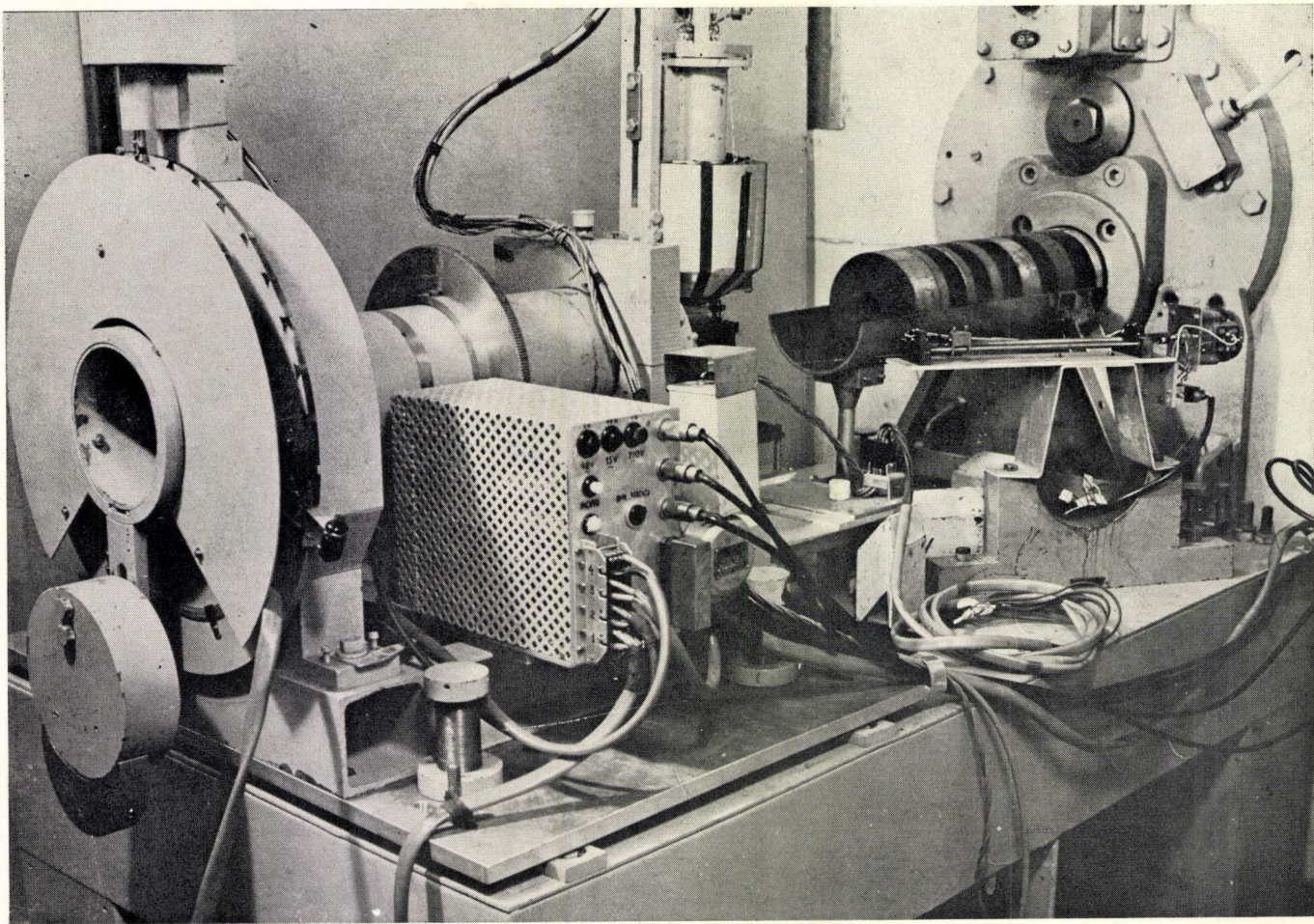
$$[(f_{7/2})_p^{-1} (f_{5/2})_p (d_{5/2})_n]_{1/2^+} \xrightarrow{E_1} [(f_{7/2})_p^{-1} (f_{5/2})_p (p_{3/2})_n]_{1/2^-, 3/2^-} \xrightarrow{M1+E2} [(p_{3/2})_n]_{3/2^-}$$

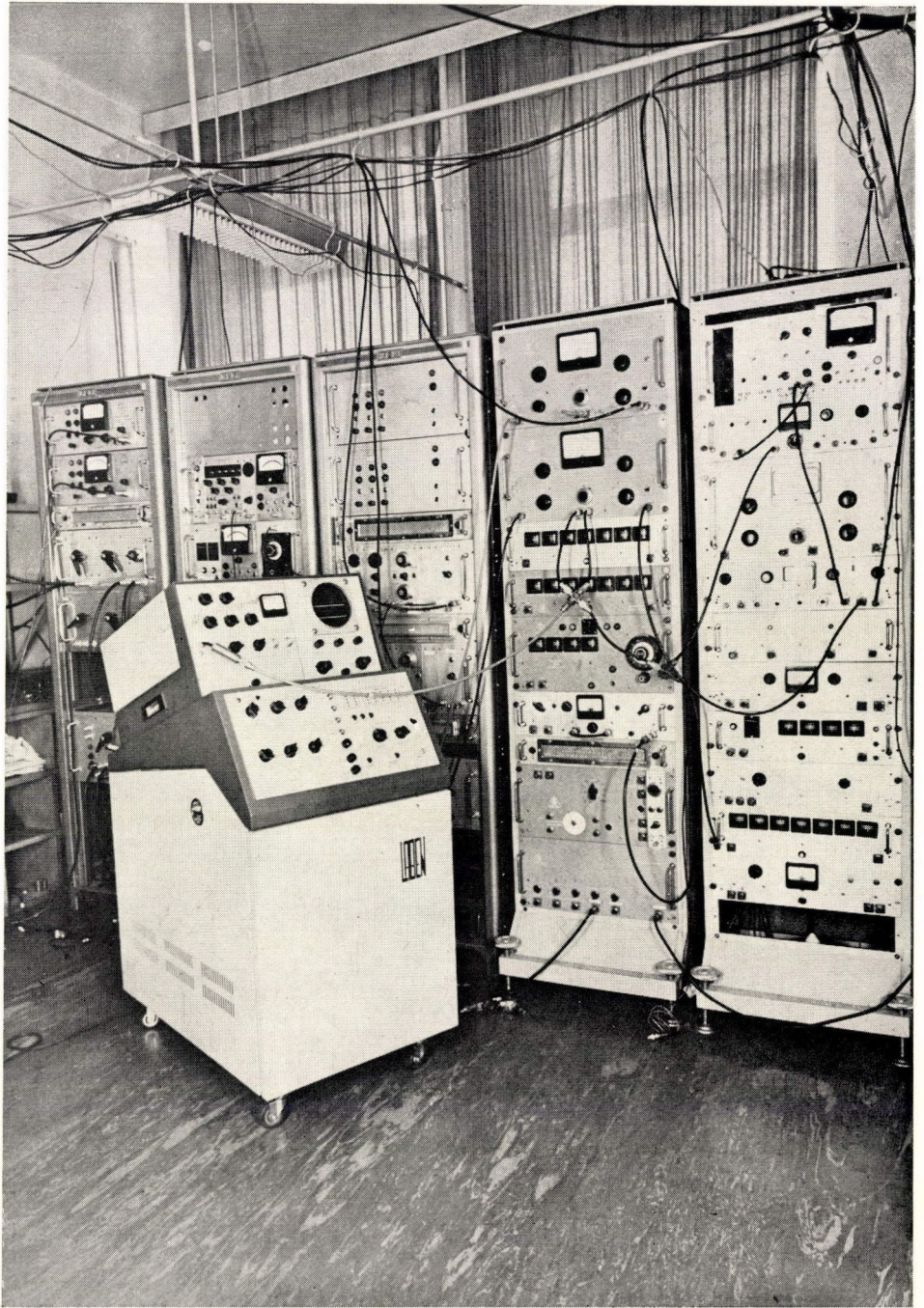
31. ábra

tosan nem direktmechanizmussal valósulnak meg és — mint láttuk — nem is közbelső módon keresztül.

A fenti tényekből a szerzők arra következtettek, hogy az (n , gamma)-reakciónál egy harmadik reakciómechanizmus is szerepet játszik. A közbelső mag és a direktmechanizmus mellett az utóbbi években ismeretessé vált egy új mechanizmus: a Feshbach-féle „doorway”-mechanizmus [Fe63]. Elképzelhető — és a szerzők szerint több jel erre utal —, hogy ez a harmadik lehetőség éppen a „doorway”-mechanizmus. E szerint az elképzelés szerint a belépő neutronból és targetmagból álló együttes a reakció első fázisában egy ún. 3-kvázirészecske (két gerjesztett részecske és egy lyuk) állapotba kerül (31. ábra), amely állapot természetes bevezetője, „kapuja” a közbelső mag mechanizmussal történő gerjesztésnek. Sok esetben ebből a fázisból továbbfejlődik a reakció és a gerjesztésben mind több és több részecske vesz részt, azaz végülis közbelső mag alakul ki, más esetekben a folyamat már ebben az első fázisban véget ér. Ez a fázis tehát bizonyos értelemben közbülső helyet foglal el a direktmechanizmus és a közbelső mag mechanizmus között.

Összefoglalva azt mondhatjuk tehát, hogy az (n , gamma)-reakciók mechanizmusának kérdése bonyolultabb mint ahogy kezdetben látszott és ma még nem tisztázott. Az már világosan látszik, hogy a közbelső mag mechanizmuson kívül más mechanizmusoknak is van szerepe. További feladat a különböző mechanizmusok relatív szerepének konkrét esetekben való elméleti és kísérleti meghatározása.





33. ábra

IRODALOM

- A53 Albert R. D., *Rev. Sci. Instr.* 24, 1096, 1953.
 Ab65 K. Abrahams *et al.*, *Proc. Int. Conf. Antwerp*. C41, 1965.
 Al60 Alexander K. F., Bredel V., *Nucl. Phys.* 17, 153, 1960.
 Al61a Alexander K. F., Brinckmann H. F., *Z. Naturf.* 16a, 210, 1961.
 Al61b Alexander K. F., Kästner R., *Kernenergie* 4, 707, 1961.
 Al62 Alexander K. F., Brinckmann H. F., *Nucl. Phys.* 32, 482, 1962.
 Al63 Alexander K. F., Brinckmann H. F., *Ann. der Phys.* 12, 225, 1963.
 An60 D'Angelo N., *Phys. Rev.* 117, 510, 1960.
 Ant65 *Proc. Int. Conf. Antwerp*. C48, 49, 53, 55, 58, 59, 1965.
 Ar63 Arad B. *et al.*, *ANL*—6797, 275, 1963.
 Ar64a Arad B. *et al.*, *Nucl. Phys.* 56, 683, 1964.
 Ar64b Arad B. *et al.*, *Phys. Rev.* 136B, 370, 1964.
 Ar64c Arad B. *et al.*, *Phys. Rev.* 133B, 684, 1964.
 As61 Ask L. *et al.*, *Arkiv f. F.* 19, 21, 1961.
 B63 Bacsó J., Daróczy S., *ATOMKI Közl.* 5, 17, 1963.
 Ba58 Bartholomew G. A., Higgs L. A., *Compilation of thermal neutron capture gamma-rays*, Atomic Energy of Canada Ltd, Chalk River Project, Rep. AECL—669, 1958.
 Ba59 Bartholomew G. A. *et al.*, *Nucl. Phys.* 10, 590, 1959.
 Ba60a Bartholomew G. A., *Proc. Int. Conf. Nuclear Structure*, Kingston, Canada, 1960, p. 573.
 Ba60b Ajzenberg-Selove F., *Nuclear Spectroscopy A*, Academic Press, New York, London, 1960, p. 304 (Bartholomew G. A.)
 Ba60c Bartholomew G. A. *et al.*, *Rep. Prog. Phys.* 23, 454, 1960.
 Ba60d Bartholomew G. A. *et al.*, *Can. J. Phys.* 38, 194, 1960.
 Ba61 Bartholomew G. A., *Ann. Rev. Nucl. Sci.* 11, 259, 1961.
 Ba64 Bartholomew G. A., Vervier J. F., *Nucl. Phys.* 50, 209, 1964.
 Bă62 Bäckström G. *et al.*, *Nucl. Instr.* 16, 199, 1962.
 Be36 Bethe H. A., *Phys. Rev.* 50, 332, 1936.
 Be61 Belfajevszkij A. I., Gurjan Ju. A., *Izv. AN SZSZSZR* 25, 1291, 1961.
 Ben62 Ben-David G., Huebschmann B., *Phys. Lett.* 3, 87, 1962.
 Ben63 Ben-David G., *ANL*—6797. 271, 1963.
 Bi51 Biedenharn L. C. *et al.*, *ORNL*—986, 1951.
 Bi53 Biedenharn L. C., Rose M. E., *Rev. Mod. Phys.* 25, 729, 1953.
 Bi60 Ajzenberg-Selove F., *Nuclear Spectroscopy B*, Academic Press, New York, 1960, p. 732 (Biedenharn L. C.)
 Bi61 Bishop C. T., *ANL*—6405, 1961.
 Bl52 Blatt J. M., Weisskopf V. F., *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley and Sons, New York, 1952.
 Bl54 Bloch C., *Phys. Rev.* 93, 1094, 1954.
 Bl64 Black J. L., Valentine E., *Nucl. Instr.* 31, 325, 1964.
 Bo59 Bockelman, C. K., *Nucl. Phys.* 13, 205, 1959.
 Bo61 Bostrom C. O., Drapor J. F., *Rev. Sci. Instr.* 32, 1024, 1961.
 Bo62 Bodenstein E., *Fortachritte der Phys.* 10, 321, 1962.
 Bo64 Bonitz M. *et al.*, *Nucl. Instr.* 31, 357, 1964.
 Br35 Breit G., Yost F. L., *Phys. Rev.* 48, 203, 1935.
 Br54 Bretscher M. M. *et al.*, *Phys. Rev.* 96, 103, 1954.
 Br56 Braid T. H., *Phys. Rev.* 102, 1109, 1956.
 Br60 DuBridge L. A., Marshall I., *Phys. Rev.* 58, 7, 1960.
 Bu59 Burmisztrov V. R., *Izv. AN SZSZSZR Fiz.* 23, 898, 1959.
 C62 O'Connel J. S. *et al.*, *Phys. Rev.* 126, 228, 1962.
 Ca64 Carlos P. *et al.*, *J. de Phys.* 25, 1013, 1964.
 Ci63 Ciuffolotti L., *Nucl. Phys.* 48, 305, 1963.
 Co61 Coté R. E., Bollinger L. M., *Phys. Rev. Lett.* 6, 695, 1961.
 Co64 Coté R. E. *et al.*, *Phys. Rev.* 135, B52, 1964.
 Cs63 Csikay J., Bacsó J., Daróczy A., *Nucl. Phys.* 41, 316, 1963.
 D57 Devons S., Goldfarb L. J. B.: *Handbuch der Physik* 42 p. 362, 1957. Springer, Berlin
 Da62 Danyiljan G. V., Korolkov I. Ja., *Izv. AN SZSZSZR Fiz.* 26, 1164, 1962.
 De63 Gyemidov A. M.: *Metodi issledoványija izlucsenyija jagyer pri ragyacionnom zahvatye* tpeplovih nyejtronov. Moszkva, 1963.

- Dr60a Draper J. E., Springer T. E., Nucl. Phys 16, 27, 1960.
 Dr60b Draper J. E., Fleischer A. A., Nucl. Instr. 9, 67, 1960.
 Dr61 Draper J. E., Fleischer A. A., Phys. Rev. 122, 1585, 1961.
 E60 Ellett, W. H., Brownell G. L., Nucl. Instr. 7, 56, 1960.
 Es60 Esztulin I. V. et al., ZSETF, 38, 758, 1960.
 Es61a Esztulin I. V. et al., Izv. AN SZSZSZR Fiz. 25, 1124, 1961.
 Es61b Esztulin I. V. et al., ZSETF 40, 64, 1961.
 Ew64 Ewan G. T., Tavendale A. J., AECL No 2079 p. 2286, 1964.
 F55 Siegbahn K.: Beta and gamma ray spectroscopy. North Holland Publishing Co, Amsterdam 1955 (Frauenfelder H.)
 Fa61 Fadel M. A.: Kandidátusi disszertáció, 1961.
 Fe54 Feshbach, H., Porter C. E., Weisskopf V. F., Phys. Rev. 96, 448, 1954.
 Fe62 Fettweis P.: Phys. Lett. 3, 40, 1962.
 Fe63 Block B., Feshbach H., Ann. of Phys. N. Y. 23, 47, 1963.
 Fi62 Fiebigler N. F. et al., Phys. Rev. 125, 2031, 2037, 1962.
 Fi65 Fink J., Kienle P., Phys. Lett. 17, 326, 1965.
 Fl63 Fleischmann H. H., Stanek F. W., Zeit F. Phys. 175, 172, 1963.
 Fr60 Freedmann M. S. et al., Nucl. Instr. 8, 255, 1960.
 G63 Green L. et al., ANL—6797, 288, 1963.
 G64 Green L., Donahue D. J., Phys. Rev. 1358, 701, 1964.
 Ge57 Gerholm T. R. et al., Nucl. Instr. 1, 107, 1957.
 Gr55 Grosev L. V. et al., Proceedings of the International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy. Geneva, 1955. Vol. 2, p. 39.
 Gr58a Grosev L. V. et al.: Atlas szpektrov gamma — lucsej ragyiacionnovo zahvata tyeplovih nyejtronov, Atomizdat, Moszkva, 1958. Atlas of gamma-ray spectra from radiative capture of thermal neutrons. 1959. Pergamon Press, London.
 Gr58b Grosev L. V. et al., Atomnaja energija 4, 5, 1958.
 Gr58c Grosev L. V. et al., Proceedings of the Peaceful Uses of Atomic Energy, Genova, Vol. 15 p. 138, paper P/2029, 1958.
 Gr60 Grosev L. V. et al., Izv. AN SZSZSZR Fiz. 24, 791, 1960.
 Gr62 Grosev L. V. et al., Izv. AN SZSZSZR Fiz. 26, 1119, 1962.
 Gu63 Gunye M. R., Bartholomew G. A., ANL Rep—6797, 259, 1963.
 H65 Huyghu V. D. et al., Saclay Report, 1965.
 Ha57 Hamermesh B. et al., Rev Sci. Instr. 28, 233, 1957.
 Ha60 Hans H. S. et al., Nucl. Phys. 20, 183, 1960.
 Ha65 Hafemeister D. W., Brooks Shera E., Phys. Rev. Lett. 14, 593, 1965.
 Ho53 Holt J. R., Marsham, T. N.: Proc. Phys. Soc. 66A, 467, 1953.
 Ho58 Hoogenboom A. M., Nucl. Instr. 3, 57, 1958.
 Hu58 Hughes, D. J., Schwartz R. B., Neutron Cross Sections, US AEC, 1958, Washington
 Hu60 Huizenga J. R., Vandenbosch R., Phys. Rev. 120, 1305, 1960.
 Hu65 V. D. Huynh et al., Proc. Int. Conf. C131, 1965.
 Ik64 Ikegami H., Emery G. T., Phys. Rev. Lett. 13, 26, 1964.
 In65 McIntyre J. A., Randall J. D., Phys. Lett. 17, 137, 1965.
 Ja60 Jánossy L., Rupp E., KFKI Közl. 8, 75, 1960.
 Je60 Jewell R., John W., UCRL—6095, 1960.
 Ja65 Jánossy L.: Theory and practice of the evaluation of measurements, Oxford, Clarendon Press, 1965.
 K60 Kamke D., Haum S., Nucl. Instr. 8, 331, 1960.
 Ka58 Kalinkin L. F. et al., ZsETF 35, 592, 1958.
 Ka60 Kazi A. H., Rev. Sci. Instr. 31, 983, 1960.
 Ka62 Kane W. R. et al., Phys. Rev. 125, 2037, 1962.
 Ka64 Karlsson E., Matthias E., Siegbahn K.: Perturbed Angular Correlations. 1964. North-Holland Publ. Co, Amsterdam
 KD61 Kardon B., Kiss D., Lovas I., Zámori Z., Nucl. Phys. 24, 151, 1961.
 KD62 Kardon B., Kiss D., Szamoszvat G. Sz., Preprint OIJaI, No 956, 1962.
 KD63 Dorcioman D., Kardon B., Kiss D., Szamoszvat G. Sz., ZSETF 46, 1578, 1964, és Magfizikai Kollokvium, Tihany. 1963.
 KD64 Gulyás I., Kardon B., Kiss D., Compt. R. Congres International de Physique Nucléaire, Paris, Vol. II. 703. p. 1964.
 KD65 Bacsó J., Csikay Gy., Kardon B., Kiss D., Nucl. Phys. 67, 443, 1965.

- KD Kardon B., Kiss D., Seres Z., Zámori Z., Nucl. Phys. (in press)
 Ke57 Kelman V. M. et al., ZsEFT 32, 39, 1957.
 Ke63 Keisch B., Phys. Rev. 129, 769, 1963.
 Ki53 Kinsey B. B., Bartholomew G. A., Can. J. Phys. 31, 537, 1953.
 Kn59a Knowles J. W. et al., Phys. Rev. 114, 1065, 1959.
 Kn59b Knowles J. W., Canad. J. Phys. 37, 203, 1959.
 Kn60 Knowles J. W. et al., Proceedings of International Conference of Nuclear Structure, Kingston, p. 576, 1960.
 Kn62 Knowles J. W., Canad. J. Phys. 40 237, 1962.
 Ko Koncz S., KFKI Közl. (megjelenés alatt)
 La60a Lane A. M., Lynn J. E., Nucl. Phys. 17, 563, 1960.
 La60b Lane A. M., Lynn J. E., Nucl. Phys. 17, 586, 1960.
 Lo61 Lovas I., ZSETF 41, 1178, 1961.
 Lo62 Lovas I., Zámori Z., Nucl. Phys. 39, 605, 1962.
 Lo64 Lovas I., Révai J., Nucl. Phys. 59, 364, 1964.
 Lo65 Lovas I., Zámori Z., Pilo neutrons in nuclear physics. Atomic Energy Review, 3, No 1, 61, 1965. IAEA, Vienna
 M62 Marlow K. W., Nucl. Inst. 15, 188, 1962.
 Ma59 Manning G., Bartholomew G. A., Phys. Rev. 115, 401, 1959.
 Ma62 Mangal S. K., Gill P. S., Nucl. Phys. 36, 542, 1962.
 Ma63 Mangal S. K., Gill P. S., Nucl. Phys. 41, 372, 1963.
 Ma60 Managan W. W., Proceedings of the total absorption gamma-ray spectrometry Symposium, Gatlinburg, Tennessee, 1960, Tid—7594
 Ma163 Malisev A. V., ZSETF 45, 316, 1963.
 Mat62 E. der Mateosian, Schgal M. L., Phys. Rev. 125, 1615, 1962.
 Me60 Meier-Leibnitz H., Pile Neutron Research in Physics, Proceedings of a Symposium, Vienna, IAEA, 1960. p. 63.
 Me61 Meier L.: Doklad na szovescsanyii po fizike medlennih njejtronov v Dubne. 1961.
 Mi62 Mihalec R., Ruskov R., Česk. Čas. Fys. 12, 325, 1962.
 Mi66 Midelkocp Nucl. Phys.
 Mo60a Motz H. T. et al., Pile neutron research in physics, Proceedings of a Symposium, Vienna, IAEA, 1960. p. 239.
 Mo60b Motz H. T., Carter R. E., Proc. Int. Conf. Nucl. Masses, Hamilton, 1960, Toronto
 Mon60 Monahan et al., Pile Neutron Research in Physics, Proceedings of a Symposium, Vienna, IAEA p. 299, 1960.
 Mu50 Muehlhause C. O., Phys. Rev. 79, 277, 1950.
 N63 Nadjakov E. G., Nucl. Phys. 48, 492, 1963.
 Ni62 Nilsson L. R., Johansson S. A. E., Ark. f. Fys. 22, 427, 1962.
 P60 Perkins R. W. et al., Rev. Sci. Instr. 31, 1344, 1960.
 Pe61 Pelehov V. I., Malov A. F., Izv. AN SZSZSZR Fiz. 25, 1069, 1961.
 Po63 Postma H., Kjeller Report 1963. ch. 30.
 R56 Roulston K. I. et al., Rev. Sci. Instr. 27, 830, 1956.
 Re55 Reier M., Shamos M. H., Phys. Rev. 100, 1302, 1955.
 Re60 Reibel K., Mann A. K., Phys. Rev. 118, 701, 1960.
 Ri61 Rijks H. J., Nucl. Instr. 14, 76, 1961.
 Ro57 Rose D. et al., Rev. Sci. Instr. 28, 233, 1957.
 Ru62 Rupp E., Tóth I., Zámori Z., KFKI Közl. 10, 219, 1962.
 S63 Schermer R. I., Phys. Rev. 130, 1907, 1963.
 Sc61 Schwäger J. E., Phys. Rev. 121, 562, 1961.
 Sc65 Sciuti S. et al., Nucl. Phys. 65 344, 1965.
 Sch60 Schult O. Z., Z. F. Phys. 158, 444, 1960.
 Sch63 Schult O. W. B. et al., ANL—6797, 111, 1963.
 Se58 Segel R. E., Phys. Rev. 111, 1620, 1958.
 Se59 Segel R. E., Phys. Rev. 113, 844, 1959.
 Se62 Sehgal M. L., Phys. Rev. 128, 761, 1962.
 Se Seres Z., KFKI Közl. (megjelenés alatt)
 Sh62 Shera E. B., Casper K. J., Nucl. Instr. 17, 174, 1962.
 S161 Gamma Lucsi, Izd. AN SZSZSZR, Moszkva—Leningrád 1961: sztr. 318 (Szliv)
 Sm65 Smither R. K., Namenson A., Bull. Am. Phys. Soc. 10, 54, 1965.
 St59 Stanford A. L., Rivers W. K., Rev. Sci. Instr. 30, 719, 1959.

- Su55 Sutyko A. V., Zareckij D. F., ZsETF 29, 866, 1955.
 Sz65 Szotnyikov Sz. K. et al., P.T.E. 1, 100, 1965.
 Szu62 Szumbajev O. I., Szmironov A. I., Programma i teziszi dokladov XII. jezsegodnovo szoves-
 csanyija po jagvernoj spektroskopii v Leningradje; Izd. AN SZSZSZR 62, 1962.
 T60 Takekoshi H., Rev. Sci. Instr. 31, 1280, 1960.
 Ta60 Taylor H. W., McPherson R., γ - γ Directional Correlation Coefficients A_2 and A_4 as
 Function of the Mixing Ratio δ 1960, Kingston, Canada.
 Ta63 Tavendale A. J., Ewan G. T., Nucl. Instr. 25, 185, 1963.
 Ta64 Tavendale A. J., AECL No 1908 p. 191, 1964.
 To61 Du Toit S. J., Bollinger L. M., Phys. Rev. 123, 629, 1961.
 Tr56 Trumpy G., Nucl. Phys. 2, 664, 1956.
 Tr57 Trumpy G., Jener Publ. Kjeller 13, 1957.
 Tr59 Trail C. C., Raboy S., Rev. Sci. Instr. 30, 425, 1959.
 Tr61 Treado P. A., Chagnon P. R., Phys. Rev. 121, 1734, 1961.
 Tro61 Troubetzkoy E. S., Phys. Rev. 122, 212, 1961.
 Ur61 Urbanec J. et al., Czech. J. Phys. 11, 559, 1961.
 Va60 Vandenbosch R., Huizenga J. R., Phys. Rev. 120, 1313, 1960.
 Ve59 Vervier J. F., Rapport CEN Blg. 39—R 1745, 1959.
 Ve61 Vervier J. F., Nucl. Phys. 26, 10, 1961.
 Wa47 Wattenberg A., Phys. Rev. 71, 497, 1947.
 Wa48 Walker, R. L., McDaniel B. D., Phys. Rev. 74, 315, 1948.
 Wa55 de Waard H., Nucl. 13 No 7, 36, 1955.
 Wa63 Wasson O. A., Draper J. E., Phys. Lett. 6, 350, 1963.
 Wa64 Wasson O. A. et al., Phys. Rev. 136B, 1640, 1964.
 We61 Welsh R. E., Donahue D. J., Phys. Rev. 121, 880, 1961.
 Wh63a White D. H., Nucl. Instr. 21, 209, 1963.
 Wh63b White D. H., Phys. Rev. 131, 777, 1963.
 Wi62 Wing J., ANL—6598, 1962.
 Wr57 Wright H. W. et al., Nucl. Sci. Eng. 2, 427, 1957.
 Z56 Zareckij D. F., Sutyko A. V., ZSETF 30, 141, 1956.
 Z59 Zareckij D. F., ZSETF 37, 1084, 1959.
 Za63 Gulyás I., Zámori Z., KFKI Közl. 11, 427, 1963.
 Za64 Zámori Z., Nucl. Phys. 52, 269, 1964.
 Zs62 Zsukov G. P. et al., Preprint OIJaI, Dubna No 1127, 1962.
 Y63 Young C. S., Donahue D. J., Phys. Rev. 132, 1724, 1963.

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMMECHANIKA MATEMATIKAI MEGALAPOZÁSA*

NEUMANN JÁNOS

Bevezetés

I. A „kvantummechanika” *Heisenberg, Dirac, Born, Schrödinger és Jordan* [1] által adott megfogalmazásai számos egészen újszerű fogalomalkotást és kérdés-feltevést vetettek fel, melyek közül a következőket szeretnénk kiemelni:

α) Kitűnt, hogy valamely atomi rendszer viselkedése valamiféleképpen összefügg egy bizonyos sajátértékproblémával — azt, hogy e sajátértékproblémát miképpen kell megfogalmazni, később, a XII. §-ban még érinteni kívánjuk —; a rendszert leíró jellemző mennyiségek speciálisan maguk a sajátértékek.

β) Ily módon megnyugtatóan megvalósult a folytonos (a klasszikus mechanikai) és a diszkontinuus (a kvantált) régóta kívánt egybeolvasztása az atomok világában; valamely sajátértékspektrumnak lehetnek ugyanis mind folytonos, mind diszkontinuus részei.

γ) Bizonyos jelek továbbá arra mutatnak az új kvantummechanikában, hogy a természettörvények (vagy legalább is az előttünk ismert kvantum törvények) az atomi történéseket nem határozzák meg kauzális egyértelműséggel; az elemi törvények ehelyett csupán valószínűség-eloszlásokat szolgáltatnak, melyek csak kivételes esetekben fajulnak el kauzális élességűvé.

δ) A sajátértékprobléma többféle alakot öltve jelentkezhet: végtelen mátrix sajátértékproblémájaként (azaz: a mátrixot átlós alakra kell transzformálnunk), vagy mint differenciálegyenlet sajátértékproblémája. Ez a két megfogalmazás azonban ekvivalens egymással; a mátrix (melyet mint lineáris transzformációt fogunk fel) a differenciáloperátorból (mely a „hullámfüggvényre” alkalmazva a differenciálegyenlet bal oldalát szolgáltatja [2]) oly módon áll elő, hogy a „hullámfüggvényről” annak valamely teljes ortogonális rendszerre vonatkoztatott kifejtési együtthatóira térünk át [3]. (A mátrix ekkor ezen kifejtési együtthatók megfelelő transzformációját írja le.)

ϵ) Mind a két tárgyalásmódnak megvannak a maga nehézségei. A mátrixmódszer esetében voltaképpen csaknem mindig megoldhatatlan problémával állunk szemben: az energia-mátrixot átlós alakra kell transzformálnunk. Ez azonban csak akkor lehetséges, ha nincs folytonos spektrum [4], azaz a tárgyalásmód egyoldalú (még ha fordított értelemben is, mint a klasszikus mechanikában): itt csak diszkontinuus (kvantált) jelleg nyilatkozik meg. (A hidrogén atom — melynek folytonos spektruma is van [5] — itt tehát nem tárgyalható kielégítően.) Persze, segíthetünk magunkon „folytonos mátrixok” használatával [6]; ez az eljárás azonban (mely voltaképpen szimultán operál mátrixokkal és integrálegyenlet-magokkal) alkalmasint csak nagy nehézségek árán vihető matematikailag szigorúan keresztül;

* Göttinger Nachrichten, Math. Phys. Kl. 1927. 1. old.

hisz' olyan fogalmak bevezetésére van szükség, mint végtelen nagy mátrixelemek vagy egymáshoz végtelenül közel eső diagonálisok.

ζ) A differenciálegyenlet-módszerre alapozott tárgyalásban a mátrix-módszer valószínűségi felvetései kezdetben nem kaptak helyet. (Ezekről alább még részletelesen lesz szó.) Ezt *Born*, valamint később *Pauli* és *Jordan*, pótolta; mindazonáltal az egész eljárás, amint azt *Jordan*, lezárt rendszerré kidolgozta [7], ugyancsak súlyos matematikai aggályokat ébreszt. Elkerülhetetlenül meg kell ugyanis engednünk ún. improprius sajátfüggvényeket is (vö. IX. §), amilyen pl. az először *Diract*-tól használt $\delta(x)$ függvény, melynek a következő (abszurd) tulajdonságokkal kellene rendelkeznie:

$$\delta(x) = 0, \quad \text{ha } x \neq 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Különleges nehézség *Jordannál*, hogy nem csak a transzformáló operátorokat kell kiszámítanunk (ezeknek integrál-magjai a „valószínűségi amplitúdók”), hanem a változók azon tartományát is, amelyre transzformálunk (azaz a sajátértékspektrumot).

9) Mindezeknek a módszereknek közös fogyatékságuk azonban, hogy elvileg megfigyelhetetlen és fizikai értelemmel nem rendelkező elemeket visznek bele a számításba: Hiszen ki kell számítanunk a sajátfüggvényeket, melyekben a normálási feltétel egy egységnyi abszolútértékű állandót ($e^{i\varphi}$ „fázist”) meghatározatlanul hagy; κ -szoros elfajulás (azaz κ -szoros sajátérték) esetén a sajátfüggvények egy egymás között elvégezhető κ -dimenziós ortogonális [8] transzformáció erejéig maradnak meghatározatlanok. A végeredményként adódó valószínűségek invariánsak ugyan, de nem kielégítő és nem is világos, hogy miért van szükség a kerülőútra a megfigyelhetetlen és a nem-invariáns mennyiségeken keresztül.

A jelen munkában olyan módszer megadását kíséreljük meg, amely orvosolja ezt a visszás helyzetét és — úgy véljük — a kvantummechanikában ma uralkodó statisztikus felfogást egységesen és következetesen összefoglalja.

Mindenütt, ahol a számítások nem tartoztak hozzá a dolog lényegéhez, elkerültük a tisztán matematikai kérdések részletezését; mindamelllett fejtegetéseink lényegében matematikailag szigorúnak tekintendők. A dolgozat nagyobb részét elkerülhetetlenül a későbbiekben alkalmazásra kerülő formális fogalomalkotások megvilágításának és megalapozásának kellett szentelnünk.

Ennek megfelelően a II—XI. §§ előkészítő jellegűek; a dolgozat tulajdonképpeni tárgya csak a XI—XIV. §§-ban kerül megtárgyalásra.

A Hilbert-tér

II. Amint azt I. δ) alatt láttuk, a sajátértékfeladatok a kvantummechanikában főként a következő két alakot öltve fordulnak elő: mint végtelen mátrixok (vagy ami ugyanaz, bilineáris alakok) sajátértékfeladatai, és mint differenciálegyenletek sajátértékfeladatai.

Ezen két megjelenési forma mindegyikét önmagában kíván szemügyre venni, és ki fogjuk emelni közös jegyeiket. Ennek során csakis olyan dolgokkal kell majd foglalkoznunk, amelyek matematikai szempontból régóta ismertek, és fizikai szem-

szögből tekintve sem nyújtanak semmi újat, minthogy azok *Schrödinger* [3] alatt idézett munkájában és *Dirac* több dolgozatában lényegében előfordulnak. Talán kíváncsiak, hogy az egészet összefüggéseiben kifejtsük, és célszerű is ezeket a fejtegetéseket előrebocsátani, hogy ezzel a következő paragrafusok absztrakt fogalomalkotásait motiváljuk.

Vegyük szemügyre először a mátrix-megfogalmazást. Itt egy végtelen mátrix áll előttünk (mely az energiát reprezentálja; azt, hogy ehhez miként juthatunk el, később kívánjuk tárgyalni), és feladatunk abban áll, hogy azt átlós alakra transzformáljuk (ekkor ugyanis az átlós elemek az energiaszintek [9]). Tegyük fel, hogy ez simán megy (azaz: csak pontspektrum van jelen, vö. I. § és [4]).

Az energiamátrixot jelölje

$$H = \{h_{\mu\nu}\} \quad (\mu, \nu = 1, 2, \dots);$$

fel kell tennünk, hogy ez hermitikus, azaz

$$h_{\mu\nu} = \bar{h}_{\nu\mu}.$$

Olyan

$$S = \{s_{\mu\nu}\} \quad (\mu, \nu = 1, 2, \dots)$$

transzformációs mátrixot keresünk, mely a következő tulajdonságú: teljesülnek rá a

$$\sum_{\varrho=1}^{\infty} s_{\mu\varrho} \bar{s}_{\nu\varrho} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu = \nu, \\ 0, & \text{ha } \mu \neq \nu \end{cases}$$

ortogonalitási feltételek és $S^{-1}HS$ átlós alakot mutat.

Az $S^{-1}HS$ mátrixot jelölje W , ezen (átlós) mátrix átlós elemei legyenek w_1, w_2, \dots . Ekkor megkívánjuk

$$HS = S, W$$

$$\sum_{\varrho=1}^{\infty} h_{\mu\varrho} s_{\varrho\nu} = s_{\mu\nu} w_\nu$$

fennállását. Azaz: S -nek ν -edik oszlopát H a w_ν -szörösébe transzformálja. Az S mátrix minden egyes oszlopa megoldása a következő sajátértékfeladatnak: meghatározandók mindazok az x_1, x_2, \dots számsorozatok, amelyeket H önmaguk többszörösébe — mondjuk w -szeresébe — transzformál. (Ekkor x_1, x_2, \dots egy saját sorozat, a w arányossági tényező egy sajátérték; a $0, 0, \dots$ triviális megoldás természetesen ki van zárva. Az $s_{1\nu}, s_{2\nu}, \dots$ sorozathoz tartozó sajátérték tehát w_ν .)

Meg lehet mármost mutatni, hogy ezek lényegében az egyetlen megoldást szolgáltatják, pontosabban: nincs olyan sajátérték, mely a w_1, w_2, \dots sajátértékektől különböznék, és ha w sajátérték, úgy annak saját sorozata az $s_{1\nu}, s_{2\nu}, \dots$ oszlopok lineáris kombinációi, amelyekre fennáll $w_2 = w$. (Vö. I. függelék.)

Következésképpen az S mátrix meghatározása lényegében megtörtént, mihelyt a sajátértékfeladat — amint azt fent megfogalmaztuk — teljes megoldást nyert.

A differenciálegyenlet-megfogalmazás esetében még világosabb a helyzet:

kezdettől fogva sajátértékfeladattal állunk szemben. Előttünk áll valamely H differenciáloperátor (így pl. a rotátor, az oszcillátor, ill. a hidrogén atom esetében

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \dots \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} \dots, \\ \frac{d}{dq^2} \dots - \frac{16\pi^4}{h^2} v_0^2 q^2 \dots, \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \dots + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \dots + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \dots + \frac{8\pi^2 m e^2}{h^2} \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \dots \right)$$

és keresünk egy olyan ψ függvényt (példáinkban ψ a $\vartheta, \varphi; q$; ill. x, y, z változók függvényeinek tekintendő), amelyre fennáll

$$H\psi = w\psi,$$

azaz amelyet H önmagának többszörösébe transzformál (a w sajátértékek a $8\pi^2 m/h^2$ tényezőtől eltekintve ismét az energiaszintek). Természetesen ψ bizonyos regularitási követelményeknek tartozik eleget tenni, és nem tűnhet el azonosan [10].

Mi mindezeknek az eseteknek a közös fő jellemvonása? Nyilvánvalóan a következő: Mindegyik esetben adott bizonyos mennyiségek sokasága (ti. valamennyi x_1, x_2, \dots számsorozaté, ill. a ϑ, φ szögek, a q koordináta, vagy az x, y, z koordináta-hármas összes ψ függvénye), valamint a H lineáris operátor e sokaságon. Mindegyik esetben a H -hoz tartozó sajátértékfeladat összes megoldását keressük, azaz mindazon (valós) w számokat, amelyekhez található e sokaságnak olyan el nem tűnő f eleme, hogy a

$$Hf = wf$$

sajátértékegyenlet fennáll. Ezek a w sajátértékek képviselik azután az energiaszinteket.

Feladatunk mármost abban áll, hogy ezen egységes megfogalmazásból kiindulva egységes feladathoz jussunk el. Ezt oly módon fogjuk elvégezni, hogy megmutatjuk: az imént felsorolt sokaságok valamennyien (valamint egyáltalában mindazok, amelyekre a kvantummechanikában ma szokásos kérdésfeltevésekből kiindulva juthatunk) lényegében véve azonosak egymással; azaz: mindannyian egyetlen sokaságból nyerhetők (melyek a következő §§-ban kívánunk ismertetni) az elnevezések pusztá megváltoztatásával.

Ebből a célból azonban pontosabban meg kell adnunk még, hogy mely számsorozatokat ill. függvényeket foglaljunk bele a fent említett sokaságokba; azaz: meg kell adni a regularitási és peremfeltételeket, melyek tudvalevőleg döntő fontosságúak a sajátértékfeladatokban.

III. Foglalkozunk először az x_1, x_2, \dots számsorozatok sokaságával. Kézenfekvő itt megkövetelni, hogy a $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ négyzetösszeg véges legyen. Ez ténylegesen teljesül a sajátértékfeladat megoldásaira (míg csak pontspektrum van jelen), hi-

szen ezek a megoldások az S mátrix egyes s_{1v}, s_{2v}, \dots oszlopai (vö. II. §); az ott támasztott követelményeknek megfelelően fennáll ugyanis:

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} s_{\mu\varrho} \bar{s}_{\mu\varrho} = \sum_{\mu=1}^{\infty} |s_{\mu\varrho}|^2 = 1.$$

(Amennyiben folytonos spektrum lép fel, úgy ezen belül a sajátértékfeladat nem oldható meg véges $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ négyzetösszegű x_1, x_2, \dots sajátsoorozatokkal. Az, hogy az általunk választott kiindulás ennek ellenére lehetővé teszi a folytonos spektrum hiánytalan tárgyalását, a következőkben ki fog tűnni.)

Az olyan x_1, x_2, \dots sorozatok esetében, amelyekre $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ tetszőleges, már a legegyszerűbb H lineáris transzformációk (azaz: $\{h_{\mu\nu}\}$ mátrixok; $\mu, \nu = 1, 2, \dots$) alkalmazása képtelen eredményre vezethet, amennyiben a $\sum_{\nu=1}^{\infty} h_{\mu\nu} x_{\nu}$ soroknak nem kell feltétlenül konvergálniuk. (Amint ki fog tűnni, a kvantummechanikában szereplő mátrixok mind olyan természetűek, hogy minden egyes sor $\sum_{\nu=1}^{\infty} |h_{\mu\nu}|^2$ négyzetösszege véges; az ilyen mátrixok esetében $\sum_{\nu=1}^{\infty} |x_{\nu}|^2$ véges voltából következik, hogy $\sum_{\nu=1}^{\infty} h_{\mu\nu} x_{\nu}$ ugyancsak konvergens [11].

Végül pedig az x_1, x_2, \dots változók tartományának éppen ez a korlátozása az, ami a végtelen mátrixok elméletében (amelyen, ill. amelynek alkalmas általánosításán a kvantummechanika matematikai felépítésének alapulnia kell) a legnagyobb mértékben bevált [12].

Indokolt tehát esetünkben a következőképpen körülhatárolt sokaságot választani: azon x_1, x_2, \dots komplex számsorozatok, amelyekre $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ véges. Ennek szokásos elnevezése: (komplex) Hilbert-tér.

Térjünk rá most a II. §-ban említett függvény-sokaságokra. Itt a tényállás, tekintettel a mellékfeltételekre (azaz a regularitási és peremfeltételekre), bonyolultabb. Rendszerint kétszeri differenciálhatóságot szokás megkívánni, továbbá az egyértelműséget, az eltűnést a végtelenben ill. az értelmezési tartomány határán, és több hasonló dolgot. Miképpen juthatunk itt egységes nézőponthoz?

A szóhajóvő függvények értelmezési tartományát (példáinkban: a \mathfrak{Q}, φ teret, azaz a gömbfelszínt; a q -teret, vagyis az egyenest; az x, y, z teret, azaz a közönséges teret) nevezzük Ω -nak. Magától értetődik, hogy csakis az Ω -ban egyértelműen definiált ψ függvények jöhetnek szóba, melyekre a H operátor alkalmazható. Ha tehát H pl. másodrendű differenciáloperátor (a kvantummechanikai feladatokban rendszerint ez a helyzet), úgy szükséges, hogy ψ kétszer differenciálható legyen.

Természetesen ez csupán azokra a helyekre vonatkozik Ω -ban, ahol ez H alkalmazását tényleg lehetővé teszi; ahol pl. H együtthatói szingularitást mutatnak (pl. a hidrogén atom esetében az $x=y=z=0$ helyen), ott ez nem szükséges [13]. Bár éppen az ilyen helyekre vonatkozóan előírva a reguláris viselkedést, nyerünk — mint ismeretes — egyáltalán sajátértékproblémát, ezt lényegesen gyengébb feltételek segítségével is kikényszeríthetjük (és ezt meg is kell tennünk).

Ennélfogva megkívánjuk, hogy $\int_{\Omega} |\psi|^2 dv$ (dv -vel a tartomány hossz-, felület- ill. térfogatelemét jelöljük) véges maradjon; ez kizárja azt, hogy H szingularitási helyein ψ túl erősen váljék végtelenné, és biztosítja a peremfeltételek egy részének teljesülését is: az eltűnést a végtelenben. Az eredmény fogja megmutatni, hogy helyes a választásunk.

Ezzel azonban a peremfeltételek bizonyos fajtáját (eltűnés valamely véges értelmzési tartomány határán) még nem ragadtuk meg. Ezek szerepének tisztázása céljából fontoljuk meg a következőket:

Ahhoz, hogy egyáltalán lehetséges legyen a sajátértékprobléma felállítása, a mátrixok esetében meg kellett kívánnunk H hermitikus szimmetriáját:

$$H = \{h_{\mu\nu}\}, \quad h_{\mu\nu} = \bar{h}_{\nu\mu};$$

a differenciálegyenlet-módszer esetében pedig az önadjungált jelleget posztuláló feltételre van szükség, mely szerint az

$$\int_{\Omega} \{\psi_1 \cdot \bar{H}\psi_2 - H\psi_1 \cdot \bar{\psi}_2\} dv$$

integrálnak mindazon ψ_1, ψ_2 függvényekre el kell tűnnie, amelyek az integrációs tartomány peremén (elégg gyorsan) zérussá válnak. (Azaz: $\{\psi_1 \cdot \bar{H}\psi_2 - H\psi_1 \cdot \bar{\psi}_2\} dv$ a $\psi_1, \bar{\psi}_2$ függvényekből és azok deriváltjaiból álló kifejezés differenciálja legyen.) Itt a peremfeltételek adott esetben igen fontosak. Legyen pl. Ω a $0,1$ szakasz, H pedig az $i \frac{d}{dx}$ operátor. Ekkor

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \{\psi_1 \cdot \bar{H}\psi_2 - H\psi_1 \cdot \bar{\psi}_2\} dv &= \int_0^1 \{\psi_1(x) \cdot [-i\bar{\psi}_2'(x)] - i\psi_1'(x) \cdot \bar{\psi}_2(x)\} dv = \\ &= -i \int_0^1 \{\psi_1(x) \bar{\psi}_2'(x) + \psi_1'(x) \bar{\psi}_2(x)\} dv = -i [\psi_1(x) \bar{\psi}_2(x)]_0^1. \end{aligned}$$

Ez bizonyosan zérus, ha ψ_1, ψ_2 eltűnik Ω végpontjaiban; ha azonban ψ_1, ψ_2 semmilyen határfeltételnek nem tesz eleget, úgy könnyen különbözhet zérustól.

Ennélfogva megkívánjuk továbbá (és ez a követelmény, mint látni fogjuk, magában foglalja a peremfeltételek utolsónak maradt, lényeges részét): ψ legyen olyan tulajdonságú, hogy reá nézve H önadjungált legyen.

Összefoglalva, a következőket kívántuk meg tehát: ψ legyen az Ω tartományban egyértelműen meghatározott, legyen továbbá olyan tulajdonságú, hogy H a ψ -re alkalmazható és reá nézve önadjungált legyen, végül

$$\int_{\Omega} |\psi|^2 dv$$

legyen véges. Látható, hogy ez az utóbbi az egyetlen nem-triviális feltétel (a sajátértékproblémát eredményező „regularitási követelmény”).

(Kézenfekvő az ellenvetés, hogy ez a követelmény elvágja az utat a folytonos spektrumhoz, ahol a sajátfüggvények sohasem négyzetesen integrálhatók. De hisz’

analóg módon állapotunk meg a mátrixok esetében is. Látni fogjuk azonban, hogy éppen ez a megszorítás a folytonos spektrum különösen előnyös — és matematikailag teljesen szigorú — felfogását teszi lehetővé, mely tökéletesen adekvát módon ragadja meg annak fizikai jelentőségét anélkül, hogy annak sajátfüggvényeiként más mint improprius képződményeket megengedne. Vö. X. §.)

Foglaljuk össze a mondottakat:

Adva van valamely \mathfrak{H} tér (a mátrix-felfogásban valamennyi véges $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ négyzetösszeggel rendelkező x_1, x_2, \dots sorozat tere, a differenciálegyenlet-felfogásban az Ω tartományon értelmezett, véges $\int_{\Omega} |\psi|^2 dv$ négyzetintegrállal rendelkező ψ függvények tere; az utóbbi esetben Ω tetszőleges dimenziószámú — körülhatárolt vagy határtalan, véges vagy végtelen — felület lehet), melynek elemeit egységesen az f, g, \dots szimbólumokkal kívánjuk jelölni. Legyen továbbá adott egy H lineáris operátor (azaz: H a \mathfrak{H} tér bizonyos f elemeihez \mathfrak{H} -nak más Hf elemeit rendeli, és reá

$$H(af) = aHf \quad (a = \text{komplex állandó}),$$

$$H(f+g) = Hf + Hg$$

teljesül), amely ezen kívül még szimmetrikus, illetve önadjungált. Ez az utóbbi feltétel is egységesen megfogalmazható. Ha ugyanis $Q(f, g)$ -n a

$$\sum_{n=1}^{\infty} x_n \bar{y}_n \text{ összeget, ill. az } \int_{\Omega} \varphi \bar{\psi} dv \text{ integrált}$$

értjük (azaz: $f = x_1, x_2, \dots, g = y_1, y_2, \dots$ a mátrixok és $f = \varphi, g = \psi$ a differenciálegyenletek esetében), úgy az egyszerűen a következőképpen hangzik: Megengedett f, g mellett legyen

$$Q(f, Hg) = Q(Hf, g).$$

Ezen H operátor

$$Hf = wf \quad (f \neq 0, w \text{ valós állandó})$$

sajátértékproblémájának megoldásait keressük. Ily módon először persze csak a pontspektrumot kapjuk meg, az általános felfogás azonban, melyhez így eljutunk, lehetővé fogja tenni számunkra, hogy azután a folytonos spektrumot is megragadjuk.

Amint látjuk, ezen megfogalmazások ezek után csak az alapul vett \mathfrak{H} teret illetően különböznek. Nem lehetne ezt is valamiképpen egységesen értelmezni?

IV. Kézenfekvő volna, ha kihasználva a $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ és $\int_{\Omega} |\psi|^2 dv$, a $\sum_{n=1}^{\infty} x_n \bar{y}_n$ és $\int_{\Omega} \varphi \bar{\psi} dv$ kifejezések hasonló szerkezetét, a következőket mondanánk: Adott az R tér, mely diszkontinuus vagy kontinuus lehet (ez az 1, 2, ... „tér” vagy pedig az Ω); vegyük szemügyre R valamennyi függvényét (valamennyi x_1, x_2, \dots számsorozatot, ill. az összes ψ függvényt Ω -ban). Lehetséges „integrálni az R térre” ($\sum_{n=1}^{\infty} x_n$

ill. $\int_{\Omega} \psi dv$), és csak azoknak a függvényeknek juttatunk szerepet, amelyek abszolút-érték-négyzetének „az R térre képezett integrálja” (azaz $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ ill. $\int_{\Omega} |\psi|^2 dv$) véges.

(Természetesen adott esetben R vegyes típusú is lehet, azaz pl. diszkrét pontokat és szakaszokat egyaránt tartalmazhat sit.)

Lényegében ezen az úton haladt *Dirac* nagyfokú következetességgel és kétségtelen sikerrel több, a kvantummechanika számára alapvető munkájában [14]. Ha mi ennek ellenére más megoldást kívánunk találni, úgy ennek az az oka, hogy a fent vázolt analógia meglehetősen felszínes marad mindaddig, amíg a matematikai szigorúság egyébként szokásos mértékéhez ragaszkodunk.

Így pl. abban az esetben, amelyben az R „teret” $1, 2, \dots$ képezi, \mathfrak{H} tehát az x_1, x_2, \dots sorozatokat foglalja magában, minden H lineáris operátor valamely $\{h_{\mu\nu}\}$ mátrix segítségével állítható elő:

$$H(x_1, x_2, \dots) = (y_1, y_2, \dots),$$

$$y_n = \sum_{\nu=1}^{\infty} h_{n\nu} x_{\nu}.$$

Ha abban az esetben, amelyben Ω a $0,1$ szakasz (\mathfrak{H} tehát az ezen szakaszon értelmezett valamennyi függvényt foglalja magában), a fentiek analógiájára kívánunk eljárni, úgy meg kell követelnünk, hogy minden H lineáris operátort valamely $\Phi(x, y)$ integrálmag állítson elő:

$$H\varphi(x) = \int_0^1 \Phi(x, y) \varphi(y) dy.$$

Ez azonban már a legegyszerűbb operátorok esetében sincs így (pl. nem állítható elő integrálmag segítségével az „egység”, mely minden φ -t önmagába viszt); ha ennek ellenére ragaszkodni kívánunk e hibás tétel helyességének fikciójához, úgy — amint azt *Dirac* teszi — „improprius” integrálmagokat kell tekintetbe vennünk sit.

Mi más úton indulunk el, mely a dolog lényegét tekintve már *Schrödinger* ekvivalenciabizonyításának (ti. a mátrix- és a differenciálegyenlet-felfogás ekvivalenciája bizonyításának; vö. [3]) is alapjául szolgált, és amely régóta ismert matematikai tényállás folyománya. Ahhoz, hogy ezt leírassuk, bizonyos előkészületekre van szükség.

Ω legyen ismét valamely felület (1 -, 2 -, ...-dimenziós, körülhatárolt vagy határtalan, véges vagy végtelen), dv pedig legyen az integráció differenciális eleme Ω -n. Vegyük szemügyre valamennyi, az Ω -n értelmezett (komplexértékű) f, g, \dots függvényt, melyekre $\int_{\Omega} |f|^2 dv$ véges; ezek képezzék a \mathfrak{H} „teret”. Az $\int_{\Omega} f \bar{g} dv$ integrál rövid jelölésére a $Q(f, g)$ szimbólumot alkalmazzuk (ez az egyetlen olyan kombináció, amelyben az Ω -ra vonatkozó integrál a következőkben felhasználásra kerül). Írjunk ezen kívül $Q(f, f)$ helyett $Q(f)$ -et (a $Q(f)$ kifejezés véges volta jellemzi \mathfrak{H} -t!).

Azt mondjuk, hogy a \mathfrak{H} -beli f és g ortogonálisak, ha

$$Q(f, g) = 0;$$

az f_1, f_2, \dots rendszert pedig ortonormált rendszernek nevezzük, ha

$$Q(f_\mu, f_\nu) = \begin{cases} 1 & (\mu = \nu), \\ 0 & (\mu \neq \nu). \end{cases}$$

Végül teljes ortonormált rendszernek az olyan ortonormált rendszert nevezzük, melyhez nem tehető hozzá további f az ortonormáltság megőrzésével. (Ez nyilvánvalóan úgy is kifejezhető, hogy — a 0-on kívül — nincs olyan f , mely minden f_n -re ortogonális volna.)

Meg lehet mutatni, hogy \mathfrak{H} -ban találhatók teljes ortonormált rendszerek (ezen és valamennyi következő bizonyítás nélkül közölt állítással kapcsolatban lásd V. §, ahol azokat részletesebben tárgyaljuk); $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ legyen egy ilyen teljes ortonormált rendszer.

Legyen f egy függvény \mathfrak{H} -ból; a

$$c_\mu = Q(f, \varphi_\mu) \quad (\mu = 1, 2, \dots)$$

mennyiségeket f kifejtési együtthatóinak nevezzük ($\varphi_1, \varphi_2, \dots$ szerint). A $\sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu|^2$ összeg mindenkor véges (mégpedig $Q(f)$), ez az ún. Parseval-képlet), és a $\sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \varphi_\mu$ sor bizonyos értelemben f -hez konvergál. E sornak ugyan Ω egyik pontjában sem kell konvergálnia; ha azonban az N -edik részletösszeg eltérését f -től (azaz: a $\sum_{\mu=1}^N c_\mu \varphi_\mu - f$ különbséget) az egész Ω tartományon figyelemmel követjük, és ezt az általános viselkedést a mondott különbség abszolútérték-négyzetének integráljával jellemezzük (minél kisebb a $Q(\sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \varphi_\mu - f)$ mennyiség, annál jobban simul $\sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \varphi_\mu$ az egész Ω tartományon — nem pedig Ω valamely speciális pontjában — az f függvényhez), úgy ez az integrál $N \rightarrow \infty$ esetén zérushoz tart (azaz

$$\lim_{N \rightarrow \infty} Q\left(\sum_{\mu=1}^N c_\mu \varphi_\mu - f\right) = 0.$$

(A konvergenciának ezt a fajtáját normában való konvergenciának — convergence en moyenne* — nevezik; az kevesebbet mond mint a „pontenkénti” konvergencia, azonban ortogonális sorfejtéseknél ez a fogalomalkotás célszerű.)

Fennáll a fentiek megfordítása is (*Fischer és Riesz F. tétele* [15]):

Ha c_1, c_2, \dots a komplex számok valamely sorozata, melyre $\sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu|^2$ véges, úgy a $\sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \varphi_\mu$ (függvény-) összeg normában konvergens (azaz létezik olyan f függ-

* A szerző által közölt francia elnevezés mellett hadd említsük meg itt a német eredeti terminusát is: *Mittelkonvergenz*. (A ford. megj.)

vény \mathfrak{H} -ban, hogy $Q(f - \sum_{\mu=1}^N c_\mu \varphi_\mu)$ zérushoz tart $N \rightarrow \infty$ esetén), és az összegül adódó f -nek c_1, c_2, \dots a kifejtési együtthatói.

Egy-egyértelmű hozzárendelést nyertünk tehát a \mathfrak{H} -t képező f -ek és a véges $\sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu|^2$ összeggel rendelkező c_1, c_2, \dots sorozatok között. Ez a hozzárendelés nyilvánvalóan lineáris, azaz ha f a c_1, c_2, \dots sorozatba megy át, úgy af (itt a komplex állandó) az ac_1, ac_2, \dots sorozatba megy át; továbbá ha f, g a c_1, c_2, \dots ill. d_1, d_2, \dots sorozatokba mennek át, úgy $f+g$ a c_1+d_1, c_2+d_2, \dots sorozatba megy át [16].

Végül $Q(f, g)$ a $\sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \bar{d}_\mu$ összegbe megy át (ez az általánosabb Parseval-képlet):

$$c_\mu = Q(f, \varphi_\mu), \quad d_\mu = Q(g, \varphi_\mu) \quad (\mu = 1, 2, \dots)$$

$$Q(f, g) = \sum_{\mu=1}^{\infty} c_\mu \bar{d}_\mu$$

melyet a következő §-ban is diszkutálni fogunk).

Minthogy azonban az x_1, x_2, \dots sorozatok terében éppen a $\sum x_\mu \bar{y}_\mu$ összeget jelöltük $Q(x, y)$ -nal (itt x az x_1, x_2, \dots , y az y_1, y_2, \dots sorozatot jelöli), ez a következőt jelenti: \mathfrak{H} leképezhető az összes, véges $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_\mu|^2$ összeggel rendelkező x_1, x_2, \dots sorozat képezte térre, oly módon, hogy az af (itt a komplex állandó), $f+g$, $Q(f, g)$ operációk — azaz mindazon operációk, amelyeket eddig a kvantummechanika leírása során felhasználtunk — önmagukba (vagyis a mondott térbeli analogonjukba) mennek át. Eszerint az egyes \mathfrak{H} terek (melyek más és más Ω -hoz tartoznak) a véges $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_\mu|^2$ jellemezte x_1, x_2, \dots sorozatok terétől (és így egymástól is) csupán az elemek és az operációk elnevezésében különböznek; ami viszont tulajdonságaikat illeti, e tekintetben teljes egyezésnek kell fennállnia.

Azaz: a kvantummechanika alapját képező különböző sorozat- és függvényterek „folytonos mátrixok” és „improprius képződmények” bevezetése nélkül is — abszolút matematikai szigorúság mellett is — egymással lényegében azonosak.

V. Mindazon x_1, x_2, \dots komplex számsorozatok terét, amelyekre $\sum_{\mu=1}^{\infty} |x_\mu|^2$ véges, komplex végtelen-dimenziós euklideszi térnek vagy komplex Hilbert-térnek nevezzük; jelöljük azt \mathfrak{H}_0 -lal.

Amint azt az előző §§-ban láttuk, az összes \mathfrak{H} függvényterek a \mathfrak{H}_0 -éival és egymáséival megegyező formális tulajdonságokkal rendelkeznek; ami bennük különböz, az csak az elemek jelölése ill. értelmezése. Kézenfekvő tehát mindezen tereket közös tulajdonságaikkal jellemezni, s a teret, mely a következőkben közölt összes jellemző tulajdonságokkal rendelkezik, absztrakt Hilbert-térnek nevezni. Ezek után azt gondolhatjuk, hogy az összes speciális sorozat- és függvényterek oly módon állnak elő, hogy az absztrakt Hilbert-tér elemeinek nevet adunk (x_1, x_2, \dots számsorozatokként vagy valamely Ω felületen értelmezett függvényekként értelmezve azokat), valahogy úgy, ahogy a relativitáselméletben a metrikus homogén négydimenziós „világ”-ból kiindulva speciális koordináta-rendszerek választásával (azaz:

a világpontoknak számnégyesek segítségével nevet adva) különféle speciális térbeli értelmezéseket nyerhetünk.

Így azzal a feladattal kerülünk szembe, hogy az absztrakt Hilbert-teret annak „belső” — vagyis az elemeknek számsorozatként vagy függvényként való értelmezésére történő hivatkozás nélkül megfogalmazható — tulajdonságai alapján írjuk le. Ezt a feladatot oly módon oldjuk meg, hogy megadunk 5 tulajdonságot, amelyekből — mint megmutatjuk — minden egyéb következik. Ez az 5 tulajdonság a „ \bar{H} absztrakt Hilbert-tér”-re vonatkozik, melynek f, g, \dots elemeire értelmezve vannak az af (itt a komplex állandó), $f+g$, $Q(f, g)$ operációk (af és $f+g$ ismét \bar{H} elemei, $Q(f, g)$ viszont komplex szám); ezek [különösen pedig $Q(f, g)$] most a III. §-ban megadott definíciójuktól függetlenül tekintendők, rájuk vonatkozóan csak az öt alább közölt axiómát feltételezzük.

Ezek természetesen teljesülnek, ha a \bar{H} teret annak H_0 „diszkontinuus realizációjával” (mindazon x_1, x_2, \dots sorozatok tere, melyekre $\sum |x_n|^2$ véges; $Q(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} x_n \bar{y}_n$) vagy pedig valamelyik H „kontinuus realizációjával” (az Ω -n értelmezett mindazon φ függvények tere, amelyekre $\int_{\Omega} |\varphi|^2 dv$ véges; $Q(\varphi, \psi) = \int_{\Omega} \varphi \bar{\psi} dv$)

helyettesítjük (vö. 2. függelék); éppen ezért ha feltételeink konkrét jelentését meg kívánjuk a magunk számára jeleníteni, az absztrakt \bar{H} helyettesíthető az említett speciális realizációk egyikével.

Most megadjuk a \bar{H} absztrakt Hilbert-tér 5 említett jellemző tulajdonságát (A. — E.). Mindegyikükhöz csatlakozva azonnal közöljük legegyszerűbb következményeiket; mindezek végeztével következik annak bizonyítása, hogy e tulajdonságok \bar{H} -t ténylegesen teljességgel meghatározzák. Ez oly módon történik, hogy megmutatjuk: \bar{H} egy-egyértelműen — az $af, f+g, Q(f, g)$ operációk invarianciája mellett — leképezhető H_0 -ra (a bizonyítás gondolatát már a IV. §-ban vázoltuk a H függvényterek esetére). Azt, hogy a H_0, H terek ténylegesen mint \bar{H} foghatók fel (azaz rendelkeznek az A. — E. tulajdonságokkal), a 2. függelékben tárgyaljuk.

A \bar{H} absztrakt (komplex) Hilbert-térre vonatkozó 5 axiómánk (A. — E.) a következőképpen hangzik:

A. \bar{H} lineáris tér.

Azaz: \bar{H} -ban elvégezhető egy $f+g$ összeadási művelet, s egy af szorzás (itt f, g a \bar{H} tér elemei, a komplex szám, $f+g$ és af szintén \bar{H} elemei); ezek az analóg vektorműveletek számítási szabályainak tesznek eleget (ezek: a 0 létezése, az összeadás kommutativitása és asszociativitása, a szorzás disztributivitása és asszociativitása).

Alapvető fogalom, mely egyedül az A. tulajdonságon alapszik, a lineáris függetlenség fogalma. A \bar{H} tér bizonyos f_1, f_2, \dots, f_k elemeit lineárisan függetlennek mondjuk, ha

$$a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_k f_k = 0$$

fennállásából $a_1 = a_2 = \dots = a_k = 0$ következik. További ilyen fogalom a \bar{H} valamely \mathfrak{M} részhalmaza által kifeszített lineáris sokaság; ez az összes $a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_k f_k$ halmaza, ahol a_1, a_2, \dots, a_k tetszőleges komplex számok, f_1, f_2, \dots, f_k pedig \bar{H} tetszőleges elemei.

B. \bar{H} metrikus tér; metrikája egy $Q(f, g)$ hermitikus-szimmetrikus bilineáris alak létezésének folyománya.

Azaz: Létezik egy $Q(f, g)$ függvény (mely \bar{H} valamennyi f, g elempárjára értelmezve van és értékészletét komplex számok képezik) a következő tulajdonságokkal:

1. $Q(af, g) = aQ(f, g)$ (itt a komplex állandó).
2. $Q(f_1 + f_2, g) = Q(f_1, g) + Q(f_2, g)$.
3. $Q(f, g) = \overline{Q(g, f)}$.

(Az 1—2. tulajdonságokból 3. folytán következik:

- 1'. $Q(f, ag) = \bar{a}Q(f, g)$.
- 2'. $Q(f, g_1 + g_2) = Q(f, g_1) + Q(f, g_2)$.

Az 1., 2., 1', 2'. tulajdonságok Q hermitikus bilinearitását fejezik ki, 3. pedig Q szimmetriájának kifejezője.) A 3. tulajdonság szerint $Q(f, f)$ mindenkor valós, így megkívánjuk még (újra $Q(f)$ -et írunk $Q(f, f)$ helyett):

4. $Q(f) \geq 0$ legyen; $= 0$ csak akkor, ha $f = 0$.

Az 1—4. tulajdonságokból nehézség nélkül következtethetünk

$$|Q(f, g)| \leq \sqrt{Q(f) \cdot Q(g)},$$

továbbá

$$\sqrt{Q(af)} = |a| \sqrt{Q(f)}$$

$$\sqrt{Q(f+g)} \leq \sqrt{Q(f)} + \sqrt{Q(g)}$$

fennállítására [17]. Ez a két utóbbi összefüggés indokolja, hogy $\sqrt{Q(f)}$ -et f abszolútértékének, $\sqrt{Q(f-g)}$ -t pedig f és g távolságának tekintsük [18].

Ily módon Q a \bar{H} teret ténylegesen metrikával, távolságfogalommal ruházza fel. Ennek folytán az olyan kifejezésmódok mint „folytonos”, „korlátos”, „tetszőlegesen közel” stb. a \bar{H} térben is értelmet nyernek.

C. \bar{H} végtelen sok dimenziós.

Azaz: \bar{H} -ban tetszőlegesen nagy (véges) számban találhatók lineárisan független elemek.

D. \bar{H} -ban található olyan sorozat, amely mindenütt sűrű.

Azaz: \bar{H} -ban található olyan f_1, f_2, \dots sorozat, amely a következő tulajdonságú: \bar{H} tetszőleges f eleméhez tetszőlegesen közel előfordulnak e sorozat elemei.

E. \bar{H} -ban érvényes a Cauchy-féle konvergencia-kritérium.

Azaz: Minden f_1, f_2, \dots sorozat, mely eleget tesz a Cauchy-féle konvergenciakritériumnak (tetszőleges $\varepsilon > 0$ számhoz található olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $N \leq m \leq n$ fennállásából $\sqrt{Q(f_m - f_n)} \leq \varepsilon$ következik), konvergens \bar{H} -ban (\bar{H} -nak van olyan f eleme, amelyre fennáll: tetszőleges $\varepsilon > 0$ számhoz található olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $N \leq m$ -ből $\sqrt{Q(f_m - f)} \leq \varepsilon$ következik).

Annak a kérdésnek tárgyalását, vajon \mathfrak{H}_0 és \mathfrak{H} eleget tesznek-e ezeknek a feltételeknek, elhalasztjuk a 2. függelékre, s rátérünk A. — E. legkézenfekvőbb következményeinek levonására; e megfontolások során — melyek lezárását $\bar{\mathfrak{H}}$ -nak \mathfrak{H}_0 -ra való, ismételten említett leképezhetősége képezi — bepillantást nyerünk az ortogonális rendszerek szerkezetébe $\bar{\mathfrak{H}}$ -ban, ami későbbi megfontolásaink szempontjából alapvető.

Ezeket az ismert matematikai okfejtéseken alapuló megfontolásokat a következő §-ban (a teljesség kedvéért) hézagmentesen keresztülviszük; az olvasó azonban megteheti, hogy — ezen megfontolásokat mellőzve — csupán a lényeges eredményeket méltatja figyelemre.

VI. Először néhány egyszerű, általános jellegű definíciót kell megadnunk.

f torlódási pontja $\bar{\mathfrak{H}}$ valamely \mathfrak{M} részhalmazának, ha \mathfrak{M} -nek f -hez tetszőlegesen közel (lásd a B.-hez fűzött megjegyzést) van eleme. A $\bar{\mathfrak{H}}$ tér valamely \mathfrak{M} részhalmaza zárt, ha \mathfrak{M} -nek minden torlódási pontja hozzátartozik \mathfrak{M} -hez; \mathfrak{M} mindenütt sűrű, ha $\bar{\mathfrak{H}}$ bármely f eleme torlódási pontja \mathfrak{M} -nek; \mathfrak{M} mindenütt sűrű \mathfrak{M} -ben, ha \mathfrak{M} -nek részhalmaza, és \mathfrak{M} -nek minden pontja \mathfrak{M} -nek torlódási pontja.

\mathfrak{M} lineáris sokaság, ha mint lineáris sokaságot önmagát feszíti ki; azaz ha az f_1, f_2, \dots, f_k elemekkel együtt tartalmazza $a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_k f_k$ -t is.

Két elem, f és g ortogonális, ha $Q(f, g) = 0$. \mathfrak{M} ortonormált rendszer, ha \mathfrak{M} -ben minden f -re, g -re

$$Q(f, g) = \begin{cases} 1, & \text{ha } f = g, \\ 0, & \text{ha } f \neq g. \end{cases}$$

\mathfrak{M} teljes ortonormált rendszer, ha nem tehető hozzá további f elem az ortonormált-ság megőrzésével; vagy ami nyilvánvalóan ugyanaz: nincs olyan f (a 0-n kívül), amely valamennyi, \mathfrak{M} -hez tartozó g -re ortogonális volna.

Immár rátérhetünk a fent jelzett tételek levezetetésére.

1. tétel. Bármely \mathfrak{M} ortonormált rendszer véges vagy pedig sorozat; minden teljes ortonormált rendszer sorozat.

Bizonyítás: Legyen \mathfrak{M} egy ortonormált rendszer, az f_1, f_2, \dots sorozat pedig legyen mindenütt sűrű \mathfrak{H} -ban. Az \mathfrak{M} ortonormált rendszer valamely két f, g elemére fennáll:

$$Q(f-g) = Q(f) - 2\Re Q(f, g) + Q(g) = 1 - 0 + 1 = 2;$$

ezen távolsága tehát $= \sqrt{2}$. Az \mathfrak{M} rendszer bármely f eleméhez található az f_1, f_2, \dots sorozatban olyan elem, amely hozzá közelebb fekszik mint $\frac{1}{2}\sqrt{2}$; a fentiek szerint \mathfrak{M} -nek két különböző f eleméhez a sorozatnak is különböző elemei tartoznak. Következésképpen \mathfrak{M} -nek legfeljebb annyi eleme van, mint a sorozatnak. Ezt kellett bizonyítanunk. — Ha \mathfrak{M} teljes, úgy azt kell megmutatnunk, hogy \mathfrak{M} nem lehet véges. Azaz meg kell mutatnunk, hogy a véges számú $\varphi_1, \dots, \varphi_k$ elem alkotta sorozathoz mindenkor található zérustól különböző ortogonális f . A $\varphi_1, \dots, \varphi_k$ elemek kifeszítette lineáris sokaságban $k+1$ lineárisan független elem nem található, $\bar{\mathfrak{H}}$ -nak tehát vannak e lineáris sokaságon kívül fekvő f elemei. Következésképpen

$$f - c_1 \varphi_1 - \dots - c_k \varphi_k$$

sohasem $= 0$, másrésről azonban $c_n = Q(f, \varphi_n)$ esetén ($n = 1, 2, \dots, k$) a $\varphi_1, \dots, \varphi_k$ elemek mindegyikére ortogonális: q. e. d.

2. tétel. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ egy ortonormált rendszer. Ekkor bármely

$$\sum_{n=1}^{\infty} Q(f, \varphi_n) \overline{Q(g, \varphi_n)}$$

sor abszolút konvergens; speciálisan $\sum_{n=1}^{\infty} |Q(f, \varphi_n)|^2 \leq Q(f)$.

Bizonyítás: A $c_n = Q(f, \varphi_n)$ esetben ($n = 1, 2, \dots$), mint ismeretes, fennáll:

$$\begin{aligned} Q\left(\sum_{n=1}^N c_n \varphi_n - f\right) &= Q(f) - \sum_{n=1}^N 2\Re Q(f, c_n \varphi_n) + \sum_{m,n=1}^N Q(c_m \varphi_m, c_n \varphi_n) = \\ &= Q(f) - \sum_{n=1}^N 2\Re \bar{c}_n Q(f, \varphi_n) + \sum_{m,n=1}^N c_m \bar{c}_n Q(\varphi_m, \varphi_n) = \\ &= Q(f) - 2 \sum_{n=1}^N |c_n|^2 + \sum_{n=1}^N |c_n|^2 = Q(f) - \sum_{n=1}^N |c_n|^2. \end{aligned}$$

Mint hogy a bal oldal mindenkor ≥ 0 , innen következik:

$$\sum_{n=1}^N |c_n|^2 \leq Q(f);$$

ezzel a

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |Q(f, \varphi_n)|^2$$

sor konvergenciája, s az is, hogy a sor összege $\leq Q(f)$ (ez a második állítás), igazolást nyert.

Az első állítás a nyilvánvaló

$$\begin{aligned} \Re Q(f, \varphi_n) \overline{Q(g, \varphi_n)} &= \left| Q\left(\frac{f+g}{2}, \varphi_n\right) \right|^2 - \left| Q\left(\frac{f-g}{2}, \varphi_n\right) \right|^2, \\ \Im Q(f, \varphi_n) Q(g, \varphi_n) &= \left| Q\left(\frac{f+ig}{2}, \varphi_n\right) \right|^2 - \left| Q\left(\frac{f-ig}{2}, \varphi_n\right) \right|^2 \end{aligned}$$

összefüggésekből következik, minthogy a jobb oldalakra vonatkozó összeg abszolút konvergens.

3. tétel. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer. A $\sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n$ sor akkor és csak akkor konvergál [19], ha $\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$ véges.

Bizonyítás: E. szerint $\sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n$ konvergenciája a következőt jelenti: bármely $\varepsilon > 0$ számhoz található olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $N \leq m \leq n$ fennállásából

$$\sqrt{Q\left(\sum_{p=1}^n c_p \varphi_p - \sum_{p=1}^m c_p \varphi_p\right)} \leq \varepsilon$$

következik. Fennáll azonban:

$$\begin{aligned} Q\left(\sum_{p=1}^n c_p \varphi_p - \sum_{p=1}^m c_p \varphi_p\right) &= Q\left(\sum_{p=m+1}^n c_p \varphi_p\right) = \sum_{p,q=m+1}^n c_p \bar{c}_q Q(\varphi_p, \varphi_q) = \\ &= \sum_{p=m+1}^n |c_p|^2 = \sum_{p=1}^n |c_p|^2 - \sum_{p=1}^m |c_p|^2; \end{aligned}$$

ezzel éppen $\sum_{p=1}^{\infty} |c_p|^2$ konvergenciájának feltételét kaptuk meg.

Kiegészítés. Ezen f -re fennáll: $Q(f, \varphi_p) = c_p$.

Bizonyítás: Ha $N \geq p$, úgy minden esetre

$$Q\left(\sum_{n=1}^N c_n \varphi_n, \varphi_p\right) = \sum_{n=1}^N c_n Q(\varphi_n, \varphi_p) = c_p.$$

Tekintettel a

$$|Q(f', g')| \leq \sqrt{Q(f') Q(g')}$$

egyenlőtlenségre, és bilineáris jellegére, Q folytonos f' -ben és g' -ben. Elvégezhetjük tehát az $N \rightarrow \infty$ határártmenetet; kapjuk: $Q(f, \varphi_p) = c_p$.

4. tétel. Legyen $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer. Az

$$f' = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n, \quad c_n = Q(f, \varphi_n)$$

sor bármely f mellett konvergens; $f - f'$ a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ elemek mindegyikére ortogonális.

Bizonyítás: Ez közvetlen folyománya a 2. és 3. tételeknek.

5. tétel. A következő három feltétel mind szükséges, mind pedig elégséges ahhoz, hogy valamely $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer teljes legyen:

- α) A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ által kifeszített lineáris sokaság mindenütt sűrű.
- β) Minden f -re fennáll:

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n, \quad c_n = Q(f, \varphi_n)$$

γ) Minden f, g elempárra fennáll:

$$Q(f, g) = \sum_{n=1}^{\infty} Q(f, \varphi_n) \overline{Q(g, \varphi_n)}.$$

Bizonyítás: Először is a teljességből következik β), minthogy a 4. tételben szereplő $f-f'$ -nek el kell tűnnie. Másodszor β)-ből következik α), minthogy f torlódási pontja a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ által kifeszített lineáris sokasághoz tartozó valamennyi

$\sum_{p=1}^N c_p \varphi_p$ -nek. Harmadszor β)-ből következik γ), hiszen

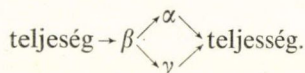
$$Q\left(\sum_{n=1}^N c_n \varphi_n - f\right) = Q(f) - \sum_{n=1}^N |c_n|^2$$

és $N \rightarrow \infty$ esetén (tekintettel arra, hogy $Q(f)$ a fent mondottaknak megfelelően folytonos) a bal oldal 0-hoz tart, így tehát

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = Q(f), \quad \sum_{n=1}^{\infty} |Q(f, \varphi_n)|^2 = Q(f);$$

ha itt f helyére rendre $\frac{f+g}{2}$ -t, $\frac{f-g}{2}$ -t, $\frac{f+ig}{2}$ -t, $\frac{f-ig}{2}$ -t helyettesítjük, s az először nyert összefüggésből kivonjuk a másodikat, továbbá a harmadikként nyertből a negyediket, kiadódik — mint a 2. tétel esetében — az állítás. Negyedszer, α)-ból következik a teljesség: f ugyanis $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ mindegyikére ortogonális, így ortogonális az általuk kifeszített egész lineáris sokaságra is, és minthogy ez utóbbi mindenütt sűrű, így tehát ortogonális önmagára is; azaz $Q(f)=0, f=0$. Végül ötödször a teljesség következik γ)-ból: ha f ortogonális $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ mindegyikére, úgy γ)-ból kapjuk f -re: $Q(f)=0, f=0$.

Felvázolható tehát a következő logikai szkéma:



Ez a 4 kijelentés tehát ugyanazt mondja.

6. tétel. Minden f_1, f_2, \dots sorozathoz található olyan $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer (mind a két sorozat véget érhet a végesben), amely ugyanazon lineáris sokaságot feszíti ki.

Bizonyítás: Az f_1, f_2, \dots sorozat első $\neq 0$ eleme legyen g_1 , az első $\neq a_1 g_1$ elem a sorozatban legyen g_2 , ugyanezen sorozat első $\neq a_1 g_1 + a_2 g_2$ eleme legyen g_3 stb. A g_1, g_2, \dots elemek nyilvánvalóan lineárisan függetlenek és ugyanazt a lineáris sokaságot feszítik ki, mint f_1, f_2, \dots . Az ismert ortogonalizálási eljárással g_1, g_2, \dots ortonormált rendszerré alakítható [20].

Kiegészítés. Léteznek teljes ortonormált rendszerek.

Bizonyítás: Válasszuk az f_1, f_2, \dots sorozatot D. szerint mindenütt sűrűnek, helyettesítsük azt a 6. tételnek megfelelően egy ortonormált rendszerrel; ez az 5. α) tétel szerint teljes.

Ha most választunk valamely $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszert, és \bar{H} minden egyes f eleméhez hozzárendeljük a c_1, c_2, \dots sorozatot ($c_n = Q(f, \varphi_n), n=1, 2, \dots$), úgy a 2. tétel szerint $c_1, c_2, \dots \bar{H}_0$ -hoz tartozik és f -et az 5. β) tételnek megfelelően

határozza meg. A \mathfrak{H} tér ezen egy-egyértelmű leképezése a 3. tétel szerint az egész \mathfrak{H}_0 -t lefedi. $A +$ és a oprációk invarianciája ezen leképezéssel szemben triviális, Q invarianciája pedig az 5. γ) tételből következik.

Ezzel ténylegesen megmutattuk, hogy mindenfajta $\bar{\mathfrak{H}}$ térnek, mely az A.—E. tulajdonságokkal rendelkezik, minden tulajdonságát illetően meg kell egyeznie a \mathfrak{H}_0 közös Hilbert-térrel. ($\bar{\mathfrak{H}}$ ezen leképezése \mathfrak{H}_0 -ra természetesen analóg \mathfrak{H} -nak \mathfrak{H}_0 -ra való leképezésével, melyet a III. §-ban vázoltunk.)

Operátorkalkulus

VII. Az előző §§ megfontolásai után az absztrakt (komplex) Hilbert-teret továbbí vizsgálataink alapjaként használhatjuk. Egyelőre (a VII—XI., XIII. §§-ban) egyáltalán nem lesz szükség arra, hogy az absztrakt Hilbert-tér különböző realizációihoz (a diszkontinuus, valamint a különböző kontinuos realizációhoz) folyamodjunk: általános fejtegetéseink ezektől mind függetlenek. Csupán a későbbiekben, a fizikai alkalmazások során kell majd a különféle realizációkkal törődnünk.

Az első, amit a $\bar{\mathfrak{H}}$ térben ki kell dolgoznunk: a formális operátorkalkulus; tudjuk (vö. a II. § végével), mily alapvető ennek a jelentősége a kvantummechanika számára.

Valamely operátor: függvény $\bar{\mathfrak{H}}$ -ban, mely $\bar{\mathfrak{H}}$ bizonyos (esetleg összes) pontjaiban értelmezve van, és amelynek értékei is $\bar{\mathfrak{H}}$ pontjai. Valamely T operátor lineáris, ha először is valamely lineáris sokaságon van értelmezve (egyáltalán nem szükséges, hogy ez zárt legyen), másodsor ha mindenkor fennáll:

$$T(a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_k f_k) = a_1 T f_1 + a_2 T f_2 + \dots + a_k T f_k$$

(itt a_1, a_2, \dots, a_k komplex állandók).

Mint már az V. §-ban megjegyeztük, az olyan kifejezések mint „folytonos”, „a kezdőpont köré írt egységömbben korlátos” a $\bar{\mathfrak{H}}$ térben értelmesek; nyilván ugyanúgy értelmes tartalmuk van a lineáris operátorok esetében [21]. Az utóbbi tulajdonság megjelölésére a Hilberttől származó „korlátos” elnevezés használatos.

A \mathfrak{H}_0 diszkontinuus realizáció esetében minden korlátos lineáris operátornak egy-egy végtelen mátrix felel meg, s a megfelelő (végtelen sok változás) bilineáris alak a korlátos bilineáris alakok azon osztályához tartozik, amelyekre Hilbert a sajátértékfeladatot teljesen megoldotta (vö. [12]). A kvantummechanika szempontjából érdeklődésre számot tartó operátorok azonban (lásd uo.) nem ebbe a fajtába tartoznak.

A \mathfrak{H} kontinuos realizáció esetében bizonyos korlátos T operátorok számára a mátrixokkal analóg

$$Tf(P) = \int_{\Omega} \Phi(P, Q) f(Q) dv_Q$$

(Q szerint integrálunk) integrálmag-előállítás rendelkezésre áll; nincs mindazonáltal ilyen előállítás a legegyszerűbb korlátos operátorokra, pl. az „egységoperátor”-ra (mely f -et f -be viszi át). Megfontolásainkat ténylegesen a mátrix- és integrálmag-előállítás igénybevétele nélkül fogjuk elvégezni.

Emlékeztetnünk kell itt bizonyos egyszerű operátorokra és operátor-számítási szabályokra. Fennáll:

$$0f=0, \quad 1f=f$$

(a 0 tehát 3 alakban lép fel: mint szám, mint a \mathfrak{H} tér pontja, és mint nulloperátor; a félreértés veszélye nyilván nem áll fenn). Fennáll továbbá:

$$(aT)f = aTf \quad (\text{itt } a \text{ komplex állandó}),$$

$$(R+T)f = Rf + Tf,$$

$$(RT)f = R(Tf).$$

Általánosan ismert, hogy ez az operátor-összeadás kommutatív és asszociatív, mindkét szorzás disztributív és asszociatív, de általában nem kommutatív, és hogy 0 és 1 a zérus ill. az egység szerepét játsszák.

Végül megjegyezzük: ha T lineáris operátor, és \mathfrak{H} valamely f eleméhez található olyan f^* , hogy fennáll

$$Q(f^*, g) = Q(f, Tg)$$

(amennyiben Tg -nek egyáltalán értelme van), úgy ezt az f^* -ot a T^*f módon jelöljük. Ha a g elemek, melyekre Tg -nek értelme van, mindenütt sűrűn fekszenek, úgy $f^* = T^*f$ egyértelműen meg van határozva. Ha ugyanis mind f_1^* , mind f_2^* a mondott tulajdonságú volna, úgy

$$Q(f_1^*, g) = Q(f_2^*, g), \quad Q(f_1^* - f_2^*, g) = 0$$

volna a g elemek mindenütt sűrű halmazára, következésképpen minden g -re is, így tehát

$$Q(f_1^* - f_2^*) = 0, \quad f_1^* = f_2^*.$$

Ezt a követelményt — hogy ti. mindenütt sűrűn elhelyezkedő g elemekre legyen értelmük — támasztjuk mostantól fogva minden vizsgálandó operátorral szemben; az valóban teljesül minden operátorra, melyre érdeklődésünk kiterjed [22].

T^* , mint azonnal látható, ugyancsak lineáris operátor (erről is feltesszük, hogy mindenütt sűrűn elhelyezkedő f -ekre értelmezve van). Definícióként fennáll rá a

$$Q(f, Tg) = Q(T^*f, g)$$

egyenlet. Hivatkozva Q tulajdonságaira (IV. § B.) könnyen igazolhatjuk (megfelelő feltevéseket téve az értelmezhetőségre) a következő összefüggéseket:

$$(aT)^* = \bar{a}T^*,$$

$$(R+T)^* = R^* + T^*,$$

$$(RT)^* = T^*R^*,$$

$$T^{**} = T.$$

A T lineáris operátort szimmetrikusnak mondjuk (ez voltaképpen a komplex hermitikus szimmetria), ha $T = T^*$. A fenti egyenletek segítségével minden további nélkül meggyőződhetünk a következő kijelentések helyességéről:

Ha T szimmetrikus, úgy a aT akkor és csak akkor szimmetrikus, ha a valós. Ha R, T szimmetrikusak, úgy $R+T$ is az; RT ezzel szemben akkor és csak akkor, ha R és T felcserélhetők ($RT=TR$).

0,1 mindketten szimmetrikusak.

VIII. Ezen általános megfontolások után térjünk át az operátorok egy fontos speciális fajtájának, az egységoperátoroknak* vizsgálatára [23]. Ezeket a következőképpen definiáljuk:

Az E szimmetrikus lineáris operátor (mely mindenütt értelmezve van), akkor egységoperátor, ha $E^2=E$. Azonnal láthatjuk, hogy 0, 1 egységoperátorok. Továbbá, E -vel együtt $1-E$ is mindenkor egységoperátor, minthogy

$$(1-E)^2 = 1 - 2E + E^2 = 1 - 2E + E = 1 - E.$$

A következőkben néhány, az egységoperátorokra vonatkozó tételt kívánunk levezetni. Ha nem is lesz az alábbiakban ezek mindegyikére szükségünk, ezek mindazonáltal alkalmasak arra, hogy ezen alapvető fogalomalkotás lényegét helyes megvilágításba helyezzék. Számunkra itt főképpen a következő két tény fontos:

Valamely egységoperátor bizonyos f -eket f -be, másokat 0-ba visz át; az előbbieket képezik a egységoperátor belsejét, az utóbbiak a külsejét. A \mathfrak{H} tér minden f eleme pontosan egyféleképpen bontható fel a $g+h$ alakban, ahol a g elem E belsejébe, h pedig a külsejébe esik; Ef ekkor f -ből a h „külső komponens” elhagyásával nyerhető.

Az egységoperátorok bizonyos értelemben nagyság szerint elrendezhetők, mégpedig az egyes egységoperátorok belsejének (vagy megfordítva: külsejének) kiterjedése szerint.

Ezen eredményeket tekintetbe véve az olvasó az alább következő fejtegetéseket akár át is ugorhatja.

(E belsejének és külsejének az imént megadott definícióját ezek során fel fogjuk használni.)

Nyilvánvalóan fennáll:

$$Q(Ef, Eg) = \begin{cases} Q(f, E^*Eg) = Q(f, E^2g) = Q(f, Eg), \\ Q(E^*Ef, g) = Q(E^2f, g) = Q(Ef, g), \end{cases}$$

speciálisan tehát

$$Q(f, Ef) = Q(Ef).$$

Ebből következik:

1. tétel. Mindenkor fennáll:

$$0 \leq Q(Ef) \leq Q(f).$$

Bizonyítás: Az első egyenlőtlenség triviális; a második abból következik, hogy $1-E$ is egységoperátor:

$$\begin{aligned} Q(f, Ef) &= Q(f) - Q(f, (1-E)f), \\ Q(Ef) &= Q(f) - Q((1-E)f) \leq Q(f). \end{aligned}$$

* Ezen operátorok ma elfogadott elnevezése: projekció-operátor. (A ford. megj.)

Így tehát minden egységoperátor folytonos; sőt igaz az is, hogy minden egységoperátor egyenletesen folytonos.

2. tétel. Ha E, F egységoperátorok, úgy EF akkor és csak akkor egységoperátor, ha E és F felcserélhetők ($EF=FE$). Az $E+F$ összeg akkor és csak akkor egységoperátor, ha $EF=0$ (vagy $FE=0$). Az $F-E$ különbség akkor és csak akkor egységoperátor, ha $EF=E$ (vagy $FE=E$).

Bizonyítás: Az EF szorzat esetében $EF=FE$ már a szimmetriához is szükséges és elégséges; minthogy ebből

$$(EF)^2 = EFEF = EEFF = E^2F^2 = EF$$

következik, ezt az esetet elintéztük.

A $E+F, F-E$ operátorok esetében a szimmetria mindig fennáll, csupán a $T^2=T$ összefüggés teljesülését kell megvizsgálnunk.

Vegyük először $E+F$ -et. Ha $E+F$ egységoperátor, úgy

$$Q(f, Ef) + Q(f, Ff) = Q(f, (E+F)f),$$

$$Q(Ef) + Q(Ff) = Q((E+F)f) \leq Q(f);$$

$Ef=f$ mellett tehát

$$Q(Ff) \leq 0, \quad Ff=0.$$

Mindenkor fennáll: $EEg = Eg$, tehát $FEg = 0$; következésképpen $FE=0$. Ha megfordítva $FE=0$, úgy egyszerismind $EF=0$ is fennáll (minthogy FE egységoperátor és így F, E felcserélhetők), írható tehát:

$$(E+F)^2 = E^2 + EF + FE + F^2 = E + 0 + 0 + F = E + F$$

következésképpen $E+F$ egységoperátor.

Azaz: $FE=0$ szükséges és elégséges; s minthogy E és F szerepe teljesen szimmetrikus, ugyanez $EF=0$ -ra is áll.

Vegyük most $F-E$ -t. Ez akkor és csak akkor egységoperátor, ha $1-(F-E) = E+(1-F)$ is az; ehhez pedig (minthogy $E, 1-F$ egységoperátorok)

$$E(1-F) = 0, \quad E=EF$$

ill.

$$(1-F)E = 0, \quad E=FE$$

fennállása szükséges és elégséges.

Vezessük be a következő kifejezésmódot: ha $E+F$ egységoperátor, az E, F operátorokról mondjuk azt, hogy idegenek*. Ha $F-E$ egységoperátor, úgy írjuk: $E \leq F$. (A 2. tétel mind a két esetre egyszerű szükséges és elégséges feltételeket szolgáltat.) Fennáll: $E \leq E$; $E \leq F$ és $F \leq E$ fennállásából $E=F$; $E \leq F, F \leq G$ fennállásából $E \leq G$ következik. Ezek láthatóan a számokra vonatkozó „kisebb vagy egyenlő” reláció jellemző tulajdonságai. A 0 minden E -t megelőz, az 1-et pedig mindegyik E megelőzi. $E \leq F$ egyet jelent azzal, hogy E és $1-F$ idegenek, vagy azzal is, hogy $1-F \leq 1-E$.

* Ma azt mondanánk, hogy ortogonálisak. (A ford. megj.)

Vizsgáljuk meg most közelebbről E belsejét, ill. külsejét. Az E operátor linearitásából és folytonosságából következik, hogy azok mindketten zárt lineáris sokaságot képeznek. Azonnal látható továbbá, hogy azok, ha E -ről $1-E$ -re térünk át, egyszerűen szerepet cserélnek. Az 1 belseje és a 0 külseje \bar{H} valamennyi f elemét tartalmazza; az 1 külseje és a 0 belseje ezzel szemben csupán a 0 -t.

3. tétel. A E belsejében fekvő f -ek megegyeznek az Eg -ekkel (g tetszőleges), az E külsejében fekvő f -ek viszont az $(1-E)g$ -ekkel.

Bizonyítás: A második következik az elsőből, amennyiben E -t $1-E$ -vel helyettesítjük; az első így bizonyítható: Ha f benne fekszik E -ben, úgy $=Ef$, s így a kívánt alakú; ha $f=Eg$, úgy

$$Ef = EEg = Eg = f$$

azaz f benne fekszik E belsejében.

4. tétel. f akkor és csak akkor fekszik E belsejében ill. külsejében, ha $Q(Ef) = Q(f)$ ill. $=0$.

Bizonyítás: A második állítás triviális ($Q(Ef)=0$ azt jelenti, hogy $Ef=0$), az első pedig E és $1-E$ felcserélésével következik a másodikból.

5. tétel. Minden f egy és csak egy módon bontható fel két tag: $g+h$ összegére, ahol g az E belsejében, h pedig a külsejében fekszik; ez a felbontás: $Ef + (1-E)f$.

Bizonyítás: Az világos, hogy $Ef + (1-E)f$ a kívánt felbontást nyújtja; ez az egyetlen ilyen felbontás, minthogy E belseje és külseje egyaránt lineáris sokaság, és nincs más közös pontjuk, mint a 0 .

6. tétel. E belseje ill. külseje \bar{H} -nak azon és csakis azon elemeiből áll, amelyek E külsejének, ill. belsejének minden elemére ortogonálisak.

Bizonyítás: Ha f ill. g az E egységoperátor belsejében ill. külsejében fekszenek, úgy ortogonálisak:

$$Q(f, g) = Q(Ef, g) = Q(f, Eg) = Q(f, 0) = 0.$$

Innen, valamint az 5. tételből nyilvánvalóan következik állításunk.

7. tétel. E és F akkor és csak akkor idegenek, ha minden, az E belsejében fekvő f az F egységoperátor külsejébe esik.

Bizonyítás: A feltétel szükséges és elégséges, miután azt mondja, hogy minden f -re, mely E belsejében fekszik, $Ff=0$, így tehát $FEfg=0$, azaz $FE=0$, E és F tehát idegenek.

8. tétel. $E \leq F$ egyet jelent azzal, hogy E belseje része F belsejének, vagy hogy F külseje része E külsejének.

Bizonyítás: $E \leq F$ azt jelenti, hogy E és $1-F$ idegenek; alkalmazzuk a 7. tételt az E , $1-F$ és az $1-F$, E operátorokra.

9. tétel. $E \leq F$ egyet jelent azzal, hogy minden f -re $Q(Ef) \leq Q(Ff)$.

Bizonyítás: Ez elégséges, ebből ugyanis következik: Ha f az F egységoperátor külsejében fekszik, úgy

$$Q(Ef) \leq Q(Ff) = 0, \quad Ef = 0,$$

azaz f egyszersmind E -nek a külsejében fekszik; így tehát $E \leq F$. S ez szükséges is, mert $E \leq F$ fennállásából következik:

$$Q(Ef) = Q(EFf) \leq Q(Ff).$$

Immár abban a helyzetben vagyunk, hogy tetszőleges szimmetrikus operátor sajátértékfeladatát megfogalmazzuk az egységoperátorok segítségével, mégpedig — ellentétben a III. §-sal — oly módon, hogy a folytonos spektrum is érvényre jusson.

A sajátértékprobléma

IX. Mint már említettük, a sajátértékprobléma legkézenfekvőbb megfogalmazása, melyet a következőkben idézünk, nem elégít ki bennünket. Ez a megfogalmazás eképpen hangzik:

Legyen T egy szimmetrikus lineáris operátor; keressük mindazon l (valós) számokat és $\bar{\xi}$ mindazon f elemeket, amelyekre

$$Tf = lf.$$

(Az l -ek a sajátértékek, az f -ek a sajátfüggvények.)

Ez a megfogalmazás azonban két lényeges fogyatkozásban szenved.

Először is az f sajátfüggvények nincsenek egyértelműen meghatározva, még akkor sem, ha azokat a $Q(f) = 1$ feltétel szerint normáljuk; egy egységnyi abszolútértékű tényező szabadon marad, többszörös sajátértékek esetében (azaz olyan l sajátértékek esetében, amelyekhez több lineárisan független sajátfüggvény tartozik) meg egyenesen a sajátfüggvények tetszőleges ortogonális* transzformációja felett rendelkezhetünk szabadon (I. § 9.).

Másodszor, felmondja a szolgálatot ez a megfogalmazás a folytonos spektrumban. Ha visszanyúlunk a \mathfrak{H}_0 ill. \mathfrak{H} realizációkhoz, úgy azt találjuk: meglehet, hogy vannak x_1, x_2, \dots sajátsorozatok vagy $f(P)$ sajátfüggvények, ezek azonban nem tartoznak hozzá a \mathfrak{H}_0 ill. \mathfrak{H} térhez, azaz

$$\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2 \quad \text{ill.} \quad \int_{\Omega} |f(P)|^2 dv$$

végtelen [24].

Így tehát más megfogalmazás után kell néznünk.

Kísérreljük meg $\bar{\mathfrak{H}}$ -t ismert felépítésű terekkel megközelíteni! Vegyük ebből a célból a \mathfrak{H}_0 diszkontinuus realizációt: valamennyi véges $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ összeggel rendelkező x_1, x_2, \dots sorozatok terét. Ez tekinthető az 1-, 2-, 3-, ...-dimenziós (komplex) euklideszi terek határesetének, ha a dimenziószám minden határon túl nő.

* Mai elnevezéssel: unitér. (A ford. megj.)

Legyen tehát $\mathfrak{R}^{(k)}$ a k -dimenziós (komplex) euklideszi tér, az összes x_1, x_2, \dots, x_k számcsoportok tere. Kézenfekvő $\mathfrak{R}^{(k)}$ -ban $Q(x, y)$ -t a $\sum_{n=1}^k x_n \bar{y}_n$ alakban (azaz: az x, y vektorok skalárszorzataként) definiálni; ekkor $\mathfrak{R}^{(k)}$ -ban minden A lineáris operátor egy-egy mátrixszal írható le (A az x vektort az

$$y_v = \sum_{\mu=1}^k a_{\mu v} x_\mu \quad (v = 1, 2, \dots, k)$$

által meghatározott y vektorba viszi át), a szimmetriát

$$a_{\mu v} = \bar{a}_{v\mu}$$

fejezi ki.

Mint ismeretes, az A -hoz tartozó

$$A(x|y) = Q(Ax|y) = Q(x|Ay) = \sum_{\mu, v=1}^k a_{\mu v} x_\mu \bar{y}_v$$

Hermite-féle alak mindenkor „főtengelyre” transzformálható:

$$A(x|y) = \sum_{p=1}^k l_p (\alpha_{p1} x_1 + \dots + \alpha_{pk} x_k) (\alpha_{p1} y_1 + \dots + \alpha_{pk} y_k),$$

ahol az $\{\alpha_{\mu v}\}$ mátrix ortogonális (unitér), azaz: a

$$Q(x|y) = \sum_{n=1}^k x_n \bar{y}_n$$

„egységformát” önmagába viszi át:

$$\sum_{n=1}^k x_n \bar{y}_n = \sum_{p=1}^k (\alpha_{p1} x_1 + \dots + \alpha_{pk} x_k) (\alpha_{p1} y_1 + \dots + \alpha_{pk} y_k).$$

Az l_1, l_2, \dots, l_k sajátértékek, mint ismeretes, a sorrendjüktől eltekintve egyértelműen meg vannak határozva, az $\alpha_{1v}, \alpha_{2v}, \dots, \alpha_{kv}$ ($v=1, 2, \dots, k$) sajátvektorok azonban nem: ezekben minden esetre szabadon marad egy egységnyi abszolútértékű tényező (a „fázis”), sőt ha több l_p sajátérték egybeesik („elfajulás”), úgy az ezekhez tartozó sajátvektorok egymás között ortogonális (unitér) transzformációnak vethetők alá.

Ennek ellenére könnyen nyerhető $A(x|y)$ számára egyértelmű normálalak:

Az l_1, l_2, \dots, l_k sajátértékek közül az egymástól különbözőket jelölje L_1, L_2, \dots, L_q ($q \leq k$); tegyük fel, hogy ezek nagyság szerint elrendezve követik egymást. Legyen továbbá

$$E(l; x|y) = \sum_{L_p \leq l} (\alpha_{p1} x_1 + \dots + \alpha_{pk} x_k) (\alpha_{p1} y_1 + \dots + \alpha_{pk} y_k).$$

Mint arról könnyen meggyőződhetünk, az L_p -k és az $E(l; x|y)$ -ok — az l_p -kben és az $\alpha_{\mu v}$ -kben fent megmutatkozott határozatlanság ellenére — egyértelműen meg vannak határozva. Az $E(l; x|y)$ -hoz tartozó mátrixot jelöljük így:

$$E(l) = \{e_{\mu v}(l)\}.$$

Nyilvánvalóan

$$A(x|y) = \sum_{q=1}^p L_q \{E(L_q; x|y) - E(L_{q-1}; x|y)\}$$

(L_0 valamilyen $< L_1$ számot jelképez). Minthogy $E(l; x|y)$, ha azt l függvényének tekintjük, az

$$l < L_1, \quad L_{q-1} \leq l < L_q \quad (q=2, \dots, p), \quad L_q \leq l$$

szakaszokon állandó, ehelyett írhatjuk még:

$$A(x|y) = \int_{-\infty}^{\infty} l dE(l; x|y), \quad Q(x|y) = \int_{-\infty}^{\infty} l dQ(x|E(l)y).$$

(Az $\int_{-\infty}^{\infty}$ integrál egy ún. Stieltjes-integrál; erről részletesebben a 3. függelékben szö-lünk.)

Itt $E(l; x|y)$ az ún. egységformákat jelöli; ezek szimmetrikusak ($e_{\mu\nu}(l) = \overline{e_{\nu\mu}(l)}$) és az $E(l)$ mátrixokra fennáll [25]:

$$E(l)^2 = E(l)$$

A megfelelő

$$E(l)x = y$$

$$y_\nu = \sum_{\mu=1}^{\infty} e_{\mu\nu}(l) x_\mu$$

operátorokat tehát a $\mathfrak{R}^{(k)}$ térben egységoperátornak tekinthetjük.

Minden további nélkül látható továbbá, hogy $l < L_1$ ill. $\geq L_p$ esetén

$$E(l; x|y) = 0 \quad \text{ill.} \quad = \sum_{q=1}^{\infty} x_q \bar{y}_q,$$

azaz: $E(l)$ zérus ill. az egység; $l \leq l'$ esetén következik:

$$E(l; x|x) \leq E(l'; x|x).$$

Az $E(l)$ mátrix tehát mindenütt konstans, kivéve a sajátértéknek megfelelő helyeken, ahol diszkontinuus ugrást végez; ugyanez áll $E(l; x|x)$ -re is, mely ezen kívül monoton növekedő függvény (vagyis nem csökken).

Ez a megfogalmazás nehézség nélkül közvetlenül átvihető a \mathfrak{H}_0 térre, s így magára \mathfrak{H} -ra is. Itt a T szimmetrikus lineáris operátorhoz újra az $E(l)$ egységoperátorok valamely serege keresendő, úgyhogy

$$Q(f, Tg) = \int_{-\infty}^{\infty} l dQ(f, E(l)g)$$

mindig teljesüljön. Ezt a tényállást röviden a

$$Tg = \int_{-\infty}^{\infty} l d(E(l)g), \quad T = \int_{-\infty}^{\infty} l dE(l)$$

alakban fejezhetjük ki.

Itt $l \leq l'$ esetén mindenkor $Q(E(l)f) \leq Q(E(l')f)$, azaz $E(l) \leq E(l')$ (megfelelően $E(l; x|x)$ monoton jellegének!). $E(l)$ -nek legfeljebb k ugrási helye volt, miután azonban k -nak végtelenné kell válnia, hogy $\mathfrak{R}^{(k)}$ \mathfrak{H}_0 -t approximálja, $E(l)$ -re vonatkozóan nem támaszthatunk analóg követelményt, Az a tény viszont, hogy $E(l)$

a zérus értékkel kezdődik (kis l -re), s végül az egységbe megy át (nagy l -re), értelem szerűen ekként interpretálható: Ha $l \rightarrow +\infty$ ill. $-\infty$, úgy $E(l)f \rightarrow f$ ill. $\rightarrow 0$.

Végül $E(l)$ mindig az ugrási helytől balra ugrik (azaz jobbról folytonos; az azt előállító összeg ugyanis $\sum_{L_p \leq l}$, nem pedig $\sum_{L_p < l}$ alakú); ennek megfelelően posztuláljuk $E(l)$ -re: $l' \rightarrow l$, $l' > l$ esetén mindenkor teljesüljön $E(l')f \rightarrow E(l)f$ is.

Foglaljuk össze feltételeinket:

Legyen T egy szimmetrikus lineáris operátor $\bar{\mathfrak{H}}$ -ban. Azt mondjuk, hogy T -t sajátérték-alakban állítottuk elő, ha megtaláltuk az $E(l)$ egységoperátorok egy seregét (minden valós l -re), melyre a következő feltételek érvényesek:

$$1. \quad Q(f, Tg) = \int_{-\infty}^{\infty} l dQ(f, E(l)g)$$

vagy röviden:

$$Tg = \int_{-\infty}^{\infty} l d\{E(l)g\}, \quad T = \int_{-\infty}^{\infty} l dE(l).$$

2a. Ha $l \leq l'$, úgy $E(l) \leq E(l')$ következik.

2b. Ha $l \rightarrow +\infty$ ill. $-\infty$, úgy $E(l)f \rightarrow f$ ill. 0 .

2c. Ha $l' \rightarrow l$, de $l' > l$, úgy $E(l')f \rightarrow E(l)f$.

Azt is mondjuk, hogy $E(l)$ a T operátorhoz tartozó egységfelbontás [26].

X. Valamely szimmetrikus lineáris operátor sajátérték-alakban való előállításának az imént megadott definíciója természetesen még bizonyos kritikai megfontolásokat igényel.

Először is közvetlenül nem világos, vajon minden szimmetrikus lineáris operátor előállítható-e sajátérték-alakban, és vajon a szimmetrikus lineáris operátor egyértelműen meghatározza-e a sajátérték-alakban való előállítást. Korlátos operátorokra Hilbert tételei szerint mindenkor egy és csak egy ilyen előállítás létezik (vö. [12]), nemkorlátos operátorokra legalábbis az egyértelműség bizonyos [27].

Nyilván kíváncsi továbbá az $E(l)$ egységoperátorok közvetlen értelmezése.

Vegyük szemügyre ebből a célból azt az egyszerű esetet, amikor is T -nek pontos spektruma van: az l_1, l_2, \dots sajátértékek, melyekhez a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvények tartoznak.

Mint ismeretes, a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvények (pl. egy folytonos realizációban, s így $\bar{\mathfrak{H}}$ -ban is) teljes ortonormált rendszert képeznek, így tehát

$$f = \sum_{n=1}^{\infty} Q(f, \varphi_n) \varphi_n,$$

és mivel azok sajátfüggvények:

$$Tf = \sum_{n=1}^{\infty} Q(f, \varphi_n) l_n \varphi_n.$$

(Minthogy csupán előzetes tájékozódásról van szó, a konvergencia kérdését nem vizsgáljuk meg behatóbban.) Következik továbbá:

$$Tf = \int_{-\infty}^{\infty} l d\left[\sum_{l_n \leq l} Q(f, \varphi_n) \varphi_n\right].$$

Ez azonban éppen a kívánt, sajátérték-alakban való előállítás, ahol

$$E(l)f = \sum_{l_n \equiv l} Q(f, \varphi_n) \varphi_n;$$

$E(l)$ nyilvánvalóan rendelkezik a IX. §-ban posztulált 1.—2. tulajdonságokkal.

Az $E(l)$ operátor hatása tehát a következőkben áll: fejtsük ki f -et a T operátor $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényei szerint, majd töröljük mindazokat a tagokat, amelyek sajátértékei $> l$. Az $E(l)$ egységoperátor belseje tehát mindazon f függvényekből áll, amelyeknek a sajátfüggvények szerint képezett sorfejtésében csak azok a sajátfüggvények lépnek fel, amelyek sajátértékei $\leq l$; az tehát mindazon sajátfüggvények lineáris kombinációinak halmaza, amelyeknek sajátértékei $\leq l$.

Ez $E(l)$ jelentése akkor is, ha folytonos spektrum van jelen: $E(l)$ belseje (s ez a VI. § szerint $E(l)$ -et meghatározza) T mindazon sajátfüggvényeinek összes lineárkombinációjából áll (ezek folytonos spektrum esetén integrálok is lehetnek), amelyeknek sajátértékei $\leq l$ [28].

Mindez természetesen nem egzakt, sok esetben azonban (minthogy a sajátfüggvényeket a folytonos spektrumban is ismerjük vagy rájuk vonatkozóan sejtésekkel rendelkezünk) útmutatást nyújt $E(l)$ felkutatásához; a IX. § végén megadott egzakt definíció ezután lehetővé teszi, hogy meggyőződjünk arról, vajon a helyes $E(l)$ -eket nyertük-e így.

Ez utóbbi eljárásra két példát adunk meg. Egy folytonos realizációt veszünk szemügyre: Ω legyen a $-\infty, \infty$ intervallum, T legyen a

$$p = \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dx} \dots \quad \text{ill.} \quad q = x \dots$$

operátor (vö. [24]).

Az első esetben a sajátfüggvények: $e^{2\pi i \frac{l}{h} x}$, az f függvény sajátfüggvények szerint való kifejtése az

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \frac{l}{h} z} f(z) dz \right] e^{2\pi i \frac{l}{h} x} dl$$

Fourier-integrál. $E(l)$ „törli” azokat a sajátfüggvényeket, amelyeknek sajátértékei $> l$:

$$E(l)f(x) = \int_{-\infty}^l \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \frac{l'}{h} z} f(z) dz \right] e^{2\pi i \frac{l'}{h} x} dl'.$$

Fennál:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} l d\{E(l)f(x)\} &= \int_{-\infty}^{\infty} l d\left\{ \int_{-\infty}^l \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \frac{l'}{h} z} f(z) dz \right] e^{2\pi i \frac{l'}{h} x} dl' \right\} = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} l \left[\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2\pi i \frac{l}{h} z} f(z) dz \right] e^{2\pi i \frac{l}{h} x} dl = \\ &= \frac{h}{2\pi i} f'(x). \end{aligned}$$

A második esetben olyan függvényeknek kellene sajátfüggvényeknek lenniök, melyek csak $x=l$ esetén $\neq 0$, ami lehetetlen. Mindazonáltal ekkor várható, hogy mindazon sajátfüggvények lineáris kombinációi, amelyeknek sajátértékei $\leq l$, egyszerűen azok a függvények, amelyek csak $x \leq l$ esetén lehetnek $\neq 0$. $E(l)$ -et így kell tehát definiálni:

$$E(l)f(x) = \begin{cases} f(x), & \text{ha } x \leq l, \\ 0, & \text{ha } x > l. \end{cases}$$

Egészen könnyű meggyőződni arról, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} l d\{E(l)f(x)\} = xf(x).$$

Végül vizsgáljuk meg a sajátérték-alakban való előállítás még egy tulajdonságát. Ez lehetővé teszi, hogy T hatványait meglehetősen egyszerű alakban állítsuk elő. Nevezetesen fennáll:

$$T^n = \int_{-\infty}^{\infty} l^n dE(l).$$

Ha $n=0$, ez triviálisan teljesül ($T^0=1$),; az $n=1$ esetben ez definíció. Mi $n=2$ -re bizonyítjuk; az összes többi n -re ugyanígy bizonyítható (azaz: pontosan úgy lehet n -ről $n+1$ -re következtetni, ahogy mi következtetünk 1-ről 2-re.).

Írható:

$$\begin{aligned} Q(f, T^2 g) &= Q(Tf, Tg) = \int_{-\infty}^{\infty} l dQ(Tf, E(l)g) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} l d \left[\int_{-\infty}^{\infty} l' dQ(E(l')f, E(l)g) \right] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} l d \left[\int_{-\infty}^{\infty} l' dQ(f, E(l')E(l)g) \right] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} l d \left[\int_{-\infty}^{\infty} l' dQ(f, E(\min l, l')g) \right]. \end{aligned}$$

Ha $l' > l$, úgy min l' , l konstans ($=l$), elegendő tehát, ha a belső integrált a $-\infty, l$ intervallumra terjesztjük ki [29]:

$$\begin{aligned} Q(f, T^2 g) &= \int_{-\infty}^{\infty} l d \left[\int_{-\infty}^l l' dQ(f, E(l')g) \right] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} l \cdot l dQ(f, E(l)g) = \int_{-\infty}^{\infty} l^2 dQ(f, E(l)g), \end{aligned}$$

vagy a mi rövidebb jelölésmódunkkal:

$$T^2 = \int_{-\infty}^{\infty} l^2 dE(l)$$

q. e. d.

Bevezetjük továbbá a következő jelölést: ha $l \leq l'$, úgy $E(l) \leq E(l')$, így tehát $E(l') - E(l)$ egységoperátor; ezt $E(l, l') = E(I)$ -nek nevezzük, ahol I az l, l' intervallum.

Operátorok abszolútértéke

XI. Mielőtt áttérnénk a fizikai alkalmazásokra, még foglalkoznunk kell a felhasználandó fogalmak utolsó kategóriájával.

Legyen A egy lineáris operátor (mely ugyanúgy, mint A^* , a $\bar{\mathfrak{H}}$ tér egy mindenütt sűrű részalmazán értelmezve van, vö. VII. §). Válasszunk két teljes ortonormált rendszert: $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ és ψ_1, ψ_2, \dots ; feltesszük, hogy $A\psi_v$ -nek értelme van [30]. Írjuk:

$$[A; \varphi_\mu, \psi_v] = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(\varphi_\mu, A\psi_v)|^2$$

(ez az összeg vagy véges, vagy végtelen, de mindig van értelme, mivel csak nem-negatív tagok lépnek fel benne).

Ekkor

$$\sum_{\mu=1}^{\infty} |Q(\varphi_\mu, A\psi_v)|^2 = Q(A\psi_v),$$

$$[A; \varphi_\mu, \psi_v] = \sum_{v=1}^{\infty} Q(A\psi_v),$$

azaz $[A; \varphi_\mu, \psi_v]$ a φ_μ -ktől csak látszólag függ. Minthogy

$$\sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(\varphi_\mu, A\psi_v)|^2 = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(A^*\varphi_\mu, \psi_v)|^2 = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(\psi_v, A^*\varphi_\mu)|^2,$$

$$[A; \varphi, \psi] = [A^*; \psi, \varphi]$$

(ha mindegyik $A^*\varphi_\mu$ -nek van értelme, vö. [30]), ugyanez a ψ_v -kről is elmondható, következésképpen $[A; \varphi, \psi]$ csak A -tól függ:

$$[A; \varphi, \psi] = [A].$$

A legutóbbi egyenletből ennek folytán

$$[A] = [A^*]$$

következik.

A $\sqrt{[A]}$ mennyiséget az A operátor abszolútértékének nevezzük; ezt most szeretnénk közelebbről megvizsgálni.

Először megállapítjuk $[A]$ kifejezését $\bar{\mathfrak{H}}$ különféle realizációiban.

A \mathfrak{H}_0 diszkontinuus realizációban A egy

$$\{a_{\mu\nu}\}, \quad a_{\mu\nu} = \bar{a}_{\nu\mu} \quad (\mu, \nu = 1, 2, \dots)$$

mátrixszal reprezentálható. Az

$$1, 0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, 0, 1, \dots, \dots$$

pontok, mint az könnyen belátható, teljes ortonormált rendszert képeznek; A hatására ezekből

$$a_{11}, a_{21}, a_{31}, \dots, a_{12}, a_{22}, a_{32}, \dots, a_{13}, a_{23}, a_{33}, \dots, \dots$$

adódik. Válasszuk ezeket a ψ_1, ψ_2, \dots ortonormált rendszer elemeivel egyenlőknek; kapjuk:

$$[A] = \sum_{\nu=1}^{\infty} Q(A\psi_{\nu}) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \left[\sum_{\mu=1}^{\infty} (a_{\mu\nu})^2 \right] = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |a_{\mu\nu}|^2.$$

Tehát: $[A]$ a mátrix valamennyi eleme abszolútérték-négyzetének összege.

A \mathfrak{H} kontinuos realizációban $[A]$ -t azon feltevés alapján kívánjuk csak kiszámítani, amely szerint az A operátor valamely integrálmag segítségével állítható elő:

$$Af(P) = \int_{\Omega} \Phi(P, Q) f(Q) dv_Q.$$

Ekkor

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_{\nu=1}^{\infty} Q(A\psi_{\nu}) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \int_{\Omega} |A\psi_{\nu}(P)|^2 dv_P = \sum_{\nu=1}^{\infty} \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} \Phi(P, Q) \psi_{\nu}(Q) dv_Q \right|^2 dv_P = \\ &= \int_{\Omega} \left[\sum_{\nu=1}^{\infty} \left| \int_{\Omega} \Phi(P, Q) \psi_{\nu}(Q) dv_Q \right|^2 \right] dv_P = \int_{\Omega} \left[\int_{\Omega} |\Phi(P, Q)|^2 dv_Q \right] dv_P = \\ &= \int_{\Omega} \int_{\Omega} |\Phi(P, Q)|^2 dv_P dv_Q. \end{aligned}$$

Eszerint $[A]$ az integrálmag abszolútérték-négyzetének integrálja.

Másodszor leszámaztatjuk $[A]$ legfontosabb tulajdonságait.

1. tétel. Mindenkor fennáll: $[A] \geq 0$, és csak akkor $= 0$, ha $A = 0$. (Következésképpen $\sqrt{[A]}$ -ra ugyanez áll.)

Bizonyítás: $[A] \geq 0$ fennállása nyilvánvaló. Ha $[A] = 0$, úgy következik:

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} Q(A\psi_{\nu}) = 0, \quad Q(A\psi_1) \geq 0, \quad A\psi_1 = 0.$$

Ha f olyan eleme \mathfrak{H} -nak, hogy Af -nek van értelme, úgy vagy $f=0$, $Af=0$; vagy $f \neq 0$, és $\varphi = \frac{1}{\sqrt{Q(f)}} f$ -re $Q(\varphi)=1$, úgyhogy $\varphi = \psi_1$ a ψ_1, ψ_2, \dots teljes ortonormált rendszerré egészíthető ki (mindegyik $A\psi_{\nu}$ -nek értelme van!); így tehát $A\varphi=0$, $Af=0$.

Következésképpen $A=0$ -nak kell fennállnia.

2. tétel. Mindenkor fennáll:

$$\begin{aligned}\sqrt{[aA]} &= |a| \sqrt{[A]}, \\ \sqrt{[A+B]} &\leq \sqrt{[A]} + \sqrt{[B]}, \\ \sqrt{[AB]} &\leq \sqrt{[A]} \sqrt{[B]}.\end{aligned}$$

Bizonyítás: Az első képlet triviális. A második következik a

$$Q((A+B)\psi_v) - Q(A\psi_v) - Q(B\psi_v) = 2\Re Q(A\psi_v, B\psi_v)$$

összefüggésből; abszolútértéket képezve:

$$\leq 2\sqrt{Q(A\psi_v)Q(B\psi_v)}$$

és végrehajtva a $\sum_{v=1}^{\infty}$ összegezést kapjuk [31]:

$$\begin{aligned}[A+B] - [A] - [B] &\leq 2 \sum_{v=1}^{\infty} \sqrt{Q(A\psi_v)Q(B\psi_v)} \leq \\ &\leq 2 \sqrt{\sum_{v=1}^{\infty} Q(A\psi_v) \sum_{v=1}^{\infty} Q(B\psi_v)} = 2 \sqrt{[A][B]}, \\ [A+B] &\leq [A] + [B] + 2 \sqrt{[A][B]} = (\sqrt{[A]} + \sqrt{[B]})^2, \\ \sqrt{[A+B]} &\leq \sqrt{[A]} + \sqrt{[B]}.\end{aligned}$$

A harmadikat pedig így bizonyítjuk:

$$\begin{aligned}[AB] &= \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(\varphi_{\mu}, AB\psi_v)|^2 = \sum_{\mu, v=1}^{\infty} |Q(A^* \varphi_{\mu}, B\psi_v)|^2 \leq \\ &\leq \sum_{\mu, v=1}^{\infty} Q(A^* \varphi_{\mu}) Q(B\psi_v) = \sum_{\mu=1}^{\infty} Q(A^* \varphi_{\mu}) \cdot \sum_{v=1}^{\infty} Q(B\psi_v) = [A^*][B] = [A][B], \\ \sqrt{[AB]} &\leq \sqrt{[A]} \sqrt{[B]}.\end{aligned}$$

3. tétel. Fennáll az

$$[A+B] = [A] + [B]$$

egyenlet, ha a következő négy egyenlet valamelyike teljesül:

$$AB^* = 0, \quad A^*B = 0, \quad BA^* = 0, \quad B^*A = 0.$$

Bizonyítás: Ha $A^*B = 0$,

$$\begin{aligned}Q((A+B)\psi_v) - Q(A\psi_v) - Q(B\psi_v) &= 2\Re Q(A\psi_v, B\psi_v) = \\ &= 2\Re Q(\psi_v, A^*B\psi_v) = 0,\end{aligned}$$

elvégezve a $\sum_{v=1}^{\infty}$ összegezést:

$$[A+B] - [A] - [B] = 0, \quad [A+B] = [A] + [B].$$

Helyettesíthetjük A -t és B -t A^* -gal és B^* -gal; ekkor $A^*B=0$ az $A^{**}B=AB^*=0$ elégséges feltételt adja; továbbá felcserélhetjük A -t B -vel, miáltal $B^*A=0$ és $BA^*=0$ adódik.

Nyilvánvalóan fennáll:

$$\sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |Q(A\varphi_{\mu}, B\psi_{\nu})|^2 = \sum_{\mu, \nu=1}^{\infty} |Q(\varphi_{\mu}, A^*B\psi_{\nu})|^2 = [A^*B].$$

A bal oldalon álló (látszólag A -tól, B -tól, a φ -ktől és a ψ -ktől függő) kifejezés tehát egyedül A^*B -től, függ. Minthogy az később jelentős szerepet fog játszani, külön jelet vezetünk be számára: az $[A, B]$ szimbólumot. Fennáll tehát:

$$[A, B] = [A^*B].$$

Az $(A^*B)^* = B^*A^{**} = B^*A$ összefüggésből speciálisan következik:

$$[A, B] = [B, A].$$

A 2. tételből következik:

$$[aA, bB] = |ab|^2 [A, B].$$

A 3. tétel szerint minden esetre fennáll

$$[A, B+C] = [A, B] + [A, C],$$

ha a következő négy feltétel valamelyike teljesül:

$$A^*B(A^*C)^* = A^*BC^*A = 0, \quad (A^*B)^*A^*C = B^*AA^*C = 0,$$

$$A^*C(A^*B)^* = A^*CB^*A = 0, \quad (A^*C)^*A^*B = C^*AA^*B = 0.$$

Minden esetre tehát $BC^*=0$ vagy $CB^*=0$ elégséges.

Főképpen $[E, F]$ típusú kifejezésekkel kell majd foglalkoznunk, ahol E, F egységoperátorok. Ha E, F felcserélhetők, úgy EF is egységoperátor; ekkor $[E, F]$ egyszerű geometriai jelentéssel rendelkezik.

Fennáll ugyanis:

$$[E, F] = [E^*F] = [EF],$$

egy $[E]$ típusú kifejezésekkel állunk tehát szemben, ahol E egységoperátor. Könnyen megadható olyan ortonormált rendszer, melynek ψ_{ν} elemei valamennyien vagy E belsejében, vagy a külsejében fekszenek [32]: ekkor

$$\begin{aligned} [E] &= \sum_{\nu=1}^{\infty} Q(E\psi_{\nu}) = \sum_{\psi_{\nu} \text{ az } E \text{ belsejében}} Q(\psi_{\nu}) + \sum_{\psi_{\nu} \text{ az } E \text{ külsejében}} Q(0) = \\ &= \sum_{\psi_{\nu} \text{ az } E \text{ belsejében}} 1 = \text{az } E \text{ belsejébe eső } \psi_{\nu}\text{-k száma.} \end{aligned}$$

Ez azonban nyilvánvalóan E belsejének dimenziószáma. Következésképpen pl. $[1] = \infty$ (mert az 1 belseje az egész \mathfrak{H} -t felöleli), és $[0] = 0$.

Az 1. és a 2. tétel azt mutatja, hogy $\sqrt{[A]}$ ténylegesen felfogható mint az operátorok abszolútértéke. Ugyanakkor nyilvánvaló, hogy azt csak a 0 közvetlen közelében használhatjuk: már $\sqrt{[1]}$ végtelen.

A kvantummechanika statisztikus alapfeltevése

XII. Most már abban a helyzetben vagyunk, hogy eredeti programunknak, a statisztikus kvantummechanika matematikailag kifogástalan egységes kiépítésének megvalósításához láthatunk. Ebből a célból először egy lehetőleg egyszerű esetet kívánunk szemügyre venni, egyértelmű eredményekkel, és az (ismert) eredményeket át kívánjuk ültetni a mi kifejezőmódunkba; ez útmutatást fog adni az általános esetben választandó utat illetően.

Ebből a célból vegyük szemügyre a folytonos realizáció lehetőleg egyszerű esetét:

Ω legyen a k -dimenziós euklideszi tér, s legyen adva egy kvantummechanikai rendszer, melynek Schrödinger-egyenlete (vö. II. §)

$$H\psi - l\psi = 0.$$

Mint ismeretes [33], a H szimmetrikus lineáris operátor a következőképpen áll elő: Az energia klasszikus-mechanikai kifejezésében, mely az energiát a q_1, q_2, \dots, q_k koordináták és a p_1, p_2, \dots, p_k impulzusok függvényeként állítja elő, mindegyik q_μ a $q_\mu \dots$ operátorral, s mindegyik p_μ a $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \dots$ operátorral helyettesíthető (Itt bizonyos többértelműség lép fel, minthogy a q_μ koordináták s a p_ν impulzusok mint közönséges számok — szorzáskor — felcserélhetők, a $q_\mu \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \dots$ operátorok ezzel szemben nem. Természetesen H -ra nézve bizonyos korlátozást jelent, hogy szimmetrikusnak kell lennie; mindazonáltal ez nem elégséges ahhoz, hogy H -t egyértelműen meghatározza. Itt a kvantummechanika egyik lényeges hiányosságával találjuk szemben magunkat.)

Feltesszük, hogy csupán pontspektrum van jelen, melynek sajátértékei valamennyien nem-elfajultak (egyszeresek); a sajátértékek jele legyen l_1, l_2, \dots , a megfelelő (normált) sajátfüggvényeké pedig $\varphi_1, \varphi_2, \dots$.

Az ezen H -hoz tartozó $E(l)$ egységfelbontást már a X. §-ban meghatároztuk. Eszerint

$$E(l)f = \sum_{l_n \equiv l} Q(f, \varphi_n) \cdot \varphi_n.$$

Szükségünk van továbbá a $q_\mu \dots$ operátorhoz tartozó $F_\mu(l)$ egységfelbontásra. Ez kézenfekvő általánosítása az ugyancsak a X. §-ban tárgyalt példának (csak ott $k=1$ volt); eszerint

$$F_\mu(l)f(q_1, \dots, q_k) = \begin{cases} f(q_1, \dots, q_k), & \text{ha } q_\mu \leq l, \\ 0, & \text{ha } q_\mu > l. \end{cases}$$

(Erre pontosan ugyanazzal a kvalitatív megfontolással juthatunk el mint ott, és ismét nehézség nélkül meggyőződhetünk a

$$q_\mu f(q_1, \dots, q_k) = \int_{-\infty}^{\infty} l d\{F_\mu(l)f(q_1, \dots, q_k)\}$$

definíciós egyenlet fennállásáról.)

Pauli és Dirac ezen esetre vonatkozó valószínűség-feltevése mármint a következőképpen hangzik [34]: ha a rendszer az n -edik (l_n, φ_n) kvantumállapotban tartózkodik, úgy annak valószínűsége, hogy a $q = (q_1, \dots, q_k)$ koordináták a k -dimenziós tér K tartományában fekjűjenek,

$$\int_K |\varphi_n(q)|^2 dq$$

adja meg (dq itt $dq_1 \dots dq_k$ helyett áll). Ez az alapfeltevés némiképpen még általánosítható. Ha csupán azt tudjuk, hogy az energia az I között fekszik, úgy e valószínűségeket (normálási faktoroktól eltekintve)

$$\sum_{l_n \in I} \int_K |\varphi_n(q)|^2 dq$$

szolgáltassa. Ténylegesen, ha I -ben csak egy sajátérték fekszik, úgy ez az előző kijelentéssel egyet jelent; ha több sajátérték fekszik I -ben, úgy következik abból, ha (mint általában szokásos) az egyes (el nem fajult) kvantumállapotokat *a priori* egyenlően valószínűeknek tekintjük.

Ez a kifejezés mármint, ha K -t ill. I -t a

$$q'_1 < q_1 \leq q''_1, \quad q'_2 < q_2 \leq q''_2, \dots, \quad q'_k < q_k \leq q''_k$$

ill.

$$l' < l \leq l''$$

egyenlőtlenségek definiálják, így is írható:

$$\begin{aligned} \sum_{l_n \in I} \int_K |\varphi_n(q)|^2 dq &= \sum_{l_n \in I} \int_{q'_1}^{q''_1} \dots \int_{q'_k}^{q''_k} |\varphi_n(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = \\ &= \sum_{l_n \in I} \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) \varphi_n(q_1, \dots, q_k)|^2 dq_1 \dots dq_k = \\ &= \sum_{l_n \in I} \int_{\Omega} |F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) \varphi_n(q)|^2 dq = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\Omega} |F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) \cdot E(l', l'') \varphi_n(q)|^2 dq = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} Q(F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) \cdot E(l', l'') \varphi_n(q)) = \\ &= [F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) \cdot E(l', l'')]. \end{aligned}$$

Az $F_\mu(q'_\mu, q''_\mu)$ operátorok, mint arról könnyen meggyőződhetünk, egymással mind felcserélhetők; ebből következik:

$$\begin{aligned} &= [(F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k))^*, E(l', l'')] = \\ &= [F_k(q'_k, q''_k) \cdot \dots \cdot F_1(q'_1, q''_1), E(l', l'')] = \\ &= [F_1(q'_1, q''_1) \cdot \dots \cdot F_k(q'_k, q''_k) E(l', l'')] \end{aligned}$$

Azaz: ha az energia I -ben fekszik, úgy annak (relatív) valószínűsége, hogy $q_1 J_1$ -ben, ..., $q_k J_k$ -ban fekszik,

$$[E(I), F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_k(J_k)].$$

Egy Jordantól kimondott feltevés szerint azonban, megfordítva, a

$$\sum_{l_n \in I} \int_K |\varphi_n(q)|^2 dq$$

mennyiség egyszersmind annak (relatív) valószínűségét szolgáltatja, hogy l_n , vagyis az energia, I -be essék, ha q K -ban (azaz $q_1 J_1$ -ben, ..., $q_k J_k$ -ban) fekszik (vö. [7]). Azaz pontosabban: a Pauli—Jordan-féle állítás csak végtelen kis K határesetére vonatkozik (ekkor a „ K térfogatát” képező arányossági tényezővel való osztás után a

$$\sum_{l_n \in I} |\varphi_n(q)|^2$$

valószínűség marad vissza). Mindemellett az ellentétes $K = \Omega$ (= az egész tér) határesetben is helyes eredmény adódik:

$$\sum_{l_n \in I} \int_{\Omega} |\varphi_n(q)|^2 dq = \sum_{l_n \in I} 1 = \text{az } l_n\text{-ek száma } I\text{-ben,}$$

Azaz: minden kvantált (nem-elfajult) állapot *a priori* egyenlően valószínű, s a nemkvantáltak nem lehetségesek (mindez a kvantumelmélet alapfeltevéseinek részét képezi).

Itt tehát a következő megállapítás adódik: ha $q_1 J_1$ -ben, ..., $q_k J_k$ -ban fekszik, úgy annak relatív valószínűségét, hogy l_n (az energia) I -be essék, ugyanaz a kifejezés szolgáltatja, amelyet az előbb felírtunk, s amelyet most az

$$[F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_k(J_k), E(I)]$$

alakba szeretnénk írni.

XIII. Az imént nyert eredmények kézenfekvővé teszik a következő feltevést:

Legyen R_1, R_2, \dots, R_i és S_1, S_2, \dots, S_j $i+j$ szimmetrikus lineáris operátor, melyek bizonyos fizikailag értelmes mennyiségeket reprezentálnak. (Természetesen azt, hogy az utóbbi — a mai kvantummechanikában nagyon is alapvető — fogalom: „adott mennyiség reprezentálása operátorral”, pontosan mit jelent, itt közelebbről nem fejthetjük ki. Vö. az előző § kezdetén közölt megfontolásokkal, melyek a klasszikus-mechanikai Hamilton-függvény és a H „energiaoperátor” viszonyára vonatkoznak.) Az R_μ ($\mu=1, 2, \dots, i$) ill. S_ν ($\nu=1, 2, \dots, j$) operátorokhoz tartozó egységfelbontás legyen $E_\mu(I)$ ill. $F_\nu(I)$.

Feltesszük, hogy valamennyi $E_\mu(I)$ felcserélhető egymással; ugyanezt tesszük fel az összes $F_\nu(I)$ -re vonatkozóan is. Ilyenkor mondjuk, hogy az R_1, R_2, \dots, R_i operátorok egymás között, ill. az S_1, S_2, \dots, S_j operátorok egymás között teljesen felcserélhetők. [Két operátor, T' és T'' teljes felcserélhetőségéhez közösleges felcserélhetőségük ($T'T''=T''T'$) minden esetre szükséges; ugyanakkor elégséges is, ha csak a két operátor közül legalább az egyik korlátos. Ha mindkét operátor nemkorlátos, úgy bizonyos formális jellegű nehézségek lépnek fel, melyekkel itt nem kívánunk részletesen foglalkozni. A kvantummechanikában fellépő minden operátor esetében a kettő ugyanazt jelenti.]

Most a következő fizikai feltevést tesszük;

Ha az R_1, \dots, R_i operátorok által képviselt mennyiségek olyan értékeket vesznek fel, amelyek rendre az I_1, \dots, I_i közőkben fekszenek, úgy annak (relatív) valószínűsége, hogy az S_1, \dots, S_j operátorok által képviselt mennyiségek a J_1, \dots, J_j közőkben fekvő értékeket vegyenek fel, az

$$[E_{I_1} \cdot \dots \cdot E_{I_i}, F_{J_1} \cdot \dots \cdot F_{J_j}] = [E_{I_1} \cdot \dots \cdot E_{I_i} \cdot F_{J_1} \cdot \dots \cdot F_{J_j}]$$

kifejezéssel egyenlő. (Az utóbbi egyenlőség azért igaz, mert az E_{I_i} operátorok egymás között mind felcserélhetők.)

A következőkben ezen feltevésből néhány következtetést vonunk le, hogy bemutassuk használhatóságát.

α) Mind az (R_1, \dots, R_i) előfeltevések, mind pedig az (S_1, \dots, S_j) állítások egymás között tetszés szerint felcserélhetők anélkül, hogy a valószínűségeloszlás megváltoznék. Ez következik abból, hogy az $E_{I_i}(I)$ ill. $F_{J_j}(J)$ operátorok, és így azok $E_{I_i}(I_{\mu})$ ill. $F_{J_j}(J_{\nu})$ különbségei is egymás között felcserélhetők.

β) Ha valamennyi előfeltevést felcseréljük az összes állítással, semmi sem változik. (Azaz a valószínűségeloszlás olyan, mintha *a priori* valószínűségekből származnék.) Ez következik az általános érvényű $[A, B] = [B, A]$ képletből.

γ) Semmitmondó előfeltevések vagy állítások tetszésünk szerint hozzátehetők a problémákhoz vagy elhagyhatók (olyanok, amelyek esetében az intervallum $-\infty, \infty$). Ezek ugyanis csupán egy

$$E_{I_i}(-\infty, \infty) \text{ vagy } F_{J_j}(-\infty, \infty) = 1 - 0 = 1$$

tényező felléptét vagy elmaradását eredményezik.

δ) A valószínűségek szorzási törvénye általában nem érvényes (érvényes azonban egy gyengébb törvény, mely „a valószínűségi amplitúdók összetevése” Jordan-féle szabályának felel meg — vö. [7] —, amellyel azonban itt nem kívánunk részletebben foglalkozni). Ez nem meglepő, minthogy valószínűségeink függőségi viszonyai tetszőlegesen bonyolultak lehetnek; ezen felül itt relatív valószínűségekkel van dolgunk.

ε) A valószínűségek összeadási törvénye érvényes. (Ez a közönséges valószínűségszámításban is a függőségi viszonyokra való tekintet nélkül teljesül.) Azt kell megmutatnunk, hogy $J'_j + J''_j = J_j$ fennállásából

$$\begin{aligned} & [E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i) \cdot F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J'_j)] + \\ & + [E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i) \cdot F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J''_j)] = \\ & = [E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i) \cdot F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J_j)] \end{aligned}$$

következik. (α) és β) alapján szorítkozhatunk ugyanis arra az esetre, amikor is az utolsó intervallumot, J_j -t bontjuk fel.) Ez így is írható:

$$[AF_j(J'_j)] + [AF_j(J''_j)] = [AF_j(J_j)].$$

A XI. § 3. tétele szerint ez bizonyosan teljesül, ha

$$\begin{aligned} & AF_j(J'_j) + AF_j(J''_j) = AF_j(J_j), \\ & AF_j(J_j)(AF_j(J''_j))^* = A \cdot F_j(J'_j) \cdot F_j(J''_j) \cdot A^* = 0. \end{aligned}$$

Az első következik az $F_j(J'_j) + F_j(J''_j) = F_j(J_j)$ egyenletből, de következik a másik is, minthogy akkor $F_j(J'_j)$, $F_j(J''_j)$ idegenek (vö. VIII. § 2. tétel). De hisz' ez világos, ha ugyanis J'_j, J''_j, J_j rendre az $l', l''; l'', l'''; l', l'''$ intervallumokat jelölik, úgy

$$F_j(J'_j) = F_j(l'') - F_j(l'),$$

$$F_j(J''_j) = F_j(l''') - F_j(l''),$$

$$F_j(J_j) = F_j(l''') - F_j(l').$$

9) Valószínűség-kifejezésünk kanonikus transzformációkkal szemben invariáns. Itt kanonikus transzformáción a következőt értjük (vö. a [7] alatt idézett munkákkal):

Legyen U az

$$UU^* = U^*U = 1$$

tulajdonságú lineáris operátor; azt mondjuk ekkor, hogy U ortogonális*. A kanonikus transzformáció abban áll, hogy minden egyes R lineáris operátort URU^* -gal helyettesítünk.

Ezen transzformációval szemben az aR , $R+S$, RS , R^* műveletek nyilvánvalóan invariánsak; invariáns az operátorok szimmetrikus volta és egységoperátorjellege is, továbbá az egységoperátorok között fennálló \leq reláció és idegen voltuk. Invariáns ezen kívül Q is, ha \bar{S} -t U önmagára képezi le:

$$Q(Uf, Ug) = Q(U^*Uf, g) = Q(f, g);$$

így tehát a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ rendszerrel együtt $U\varphi_1, U\varphi_2, \dots$ is teljes ortonormált rendszer, amiből következik $[A]$ invarianciája. Nyilvánvalóan invariáns továbbá a sajátérték-alakban való előállítás is (IX. §).

Minthogy így módon az általunk használt fogalmak egyike sem változik, ugyanez áll az ezen fogalmakon alapuló (relatív) valószínűsége is.

Alkalmazások

XIV. Most néhány fizikai alkalmazást tárgyalunk.

Először foglalkozunk a Schrödinger-egyenlettel. Nem-elfajult rendszerek eseteére ezt már a XII. §-ban tárgyaltuk, s ha meg is engedjük elfajulásokat, azaz többszörös sajátértékek felléptét, az ott nyert eredmények változatlanul érvényesek. Az egyes energiaszintek *a priori* valószínűségei pl. (vö. a XII. §-ban használt jelölésekkel)

$$[F_1(-\infty, \infty) \dots F_k(-\infty, \infty), E(I)] = [1, E(I)] = [E(I)] =$$

$$= \text{az } E(I) \text{ egységoperátor belsejének dimenziószáma.}$$

$E(I)$ belsejét azonban, mint tudjuk, az

$$a_1\varphi_{v_1}(q) + a_2\varphi_{v_2}(q) + \dots$$

alakú lineáris kombinációk képezik, ahol l_{v_1}, l_{v_2}, \dots a H operátor I -ben fekvő sajátértékei (a többszörös sajátértékeket annyszor írjuk fel, amennyi a multiplicitásuk),

* Mai szóval: unitér.

$\varphi_{v_1}, \varphi_{v_2}, \dots$ a megfelelő sajátfüggvények. A mondott dimenziószám tehát az I -be eső sajátértékek száma.

Ez az eredmény tehát a következőket jelenti: valamely kvantált állapot *a priori* valószínűségét a megfelelő sajátérték multiplicitása adja meg, a nem-kvantált állapotok nem lehetségesek.

Másodszorban foglalkozzunk az éles kauzális függés esetével. Legyen $i=1$, $j=1$; feltesszük, hogy adott valamely mennyiség, egy másik mennyiséget — mely az előbbinek függvénye, azaz: általa kauzálisan meg van határozva — pedig ismerni kívánunk. A megfelelő operátorok legyenek R és S , $S=f(R)$, ahol $f(x)$ valós függvény. Feltesszük, hogy $f(x)$ monoton nő.

(Az $i=1$, $j=1$ korlátozás, valamint $f(x)$ monotonitása nem szükséges; e feltevéseket a — csupán tájékoztató jellegű — számítás egyszerűsítése érdekében tesszük.)

Az R -hez tartozó egységfelbontás legyen $E(I)$:

$$R = \int_{-\infty}^{\infty} I dE(I)$$

Mint a X. §-ban megmutattuk, ekkor

$$R^n = \int_{-\infty}^{\infty} I^n dE(I),$$

tehát

$$S = f(R) = \int_{-\infty}^{\infty} f(I) dE(I) = \int_{-\infty}^{\infty} f'(I') dE(I'),$$

ahol g az f függvény inverze. Így tehát az S -hez tartozó egységfelbontás $E(g(I))$.

Ha J az I', I'' közt jelenti, úgy $g(J)$ -n a $g(I')$, $g(I'')$ intervallumot értjük. Fennáll tehát:

$$F(J) = E(g(J)),$$

s következésképpen

$$[E(I), F(J)] = [E(I)F(J)] = [E(I)E(g(J))] = [E(I \cdot g(J))]$$

$[I \cdot g(J)]$ -n az I és $g(J)$ intervallumok közös részét értjük; könnyű meggyőződni arról, hogy mindenkor fennáll $E(I) \cdot E(J') = E(I \cdot J')$.

Ha az I , $g(J)$ intervallumoknak nincs közös részük, úgy ez $=0$; $I \cdot g(J)$ azonban akkor üres, ha nincs olyan x az I közben, melyre $f(x)$ J -hez tartoznék. A kauzális kapcsolatnak ellentmondó értékek tehát nem lépnek fel.

Ha $I \cdot g(J)$ nem üres, úgy az az I -be tartozó azon x -ek I' intervalluma, amelyekre $f(x)$ J -ben fekszik, azaz amelyek a kauzális kapcsolatnak megfelelően szóba jönnek. A valószínűség eszerint

$$[E(I')] = E(I') \text{ belsejének dimenziószáma, vagy, mint tudjuk,}$$

$$= \text{az } R \text{ operátor } I' \text{-ben fekvő sajátértékeinek száma.}$$

Azaz: a kauzális kapcsolatok esetében, ha R kvantált, a megszokott kvantumelméleti eredmény adódik. (Egyébként ha R -nek folytonos spektruma van és az belenyúlik I' -be, ez a valószínűség $=\infty$.)

Úgy véljük, hogy e két példával megmutattuk, hogy a statisztikus kvantummechanika, valószínűségi jellege ellenére, nagyon is képes éles és pontos kijelentéseket tenni, valahányszor a körülmények ezt indokolják: pl. az abszolúte éles kvantumtiltások és az oksági kapcsolatok esetében.

Végül harmadikként vegyük szemügyre az időtől függő rendszerek *Born*-tól megadott tárgyalását [35]:

A rendszer Hamilton-függvénye explicite függ az időtől, s hasonlóképpen a megfelelő $H(t)$ operátor is (az időt számként, nem pedig mint „fizikai mennyiséget” — azaz operátort — kezeljük). Elfajulás ne álljon fenn; a sajátfüggvények a t_0 időpontban legyenek

$$\varphi_1^{(0)}, \varphi_2^{(0)}, \dots,$$

a t időpontban pedig

$$\varphi_1^{(t)}, \varphi_2^{(t)}, \dots$$

Ekkor *Born* szerint [36] annak valószínűsége, hogy a rendszer a t időben a v -edik állapotban tartózkodik, ha a t_0 időben a μ -edikben volt, $|c_{\mu v}(t)|^2$, ahol $c_{\mu v}(t)$ a $\varphi_v^{(t)}$ sajátfüggvény μ -edik kifejtési együtthatója a $\varphi_1^{(0)}, \varphi_2^{(0)}, \dots$ sajátfüggvények szerint:

$$\varphi_\mu^{(t)} = \sum_{v=1}^{\infty} c_{\mu v}(t) \varphi_v^{(0)}.$$

Legyen ugyanis $E_0(I)$ a $H(t_0)$ -hoz tartozó egységfelbontás, $E_t(I)$ pedig a $H(t)$ -hez tartozó. Mint a X. §-ban láttuk, $E_0(I)$ ill. $E_t(I)$ belsejét azon $\varphi_\mu^{(0)}$ ill. $\varphi_v^{(t)}$ sajátfüggvények összes lineáris kombinációi képezik, amelyekhez tartozó sajátértékek $\leq I$; $E_0(I)$ ill. $E_t(I)$ belseje tehát mindazoknak a $\varphi_\mu^{(0)}$ ill. $\varphi_v^{(t)}$ sajátfüggvényeknek összes lineáris kombinációiból áll, amelyeknek sajátértékei I -ben fekszenek.

Tartalmazza mármint I_μ a $H(0)$ operátor egyetlen sajátértékét, a μ -ediket, J_v pedig $H(t)$ egyetlen sajátértékét, a v -ediket. Ekkor $E_0(I_\mu)$ ill. $E_t(J_v)$ belsejét $\varphi_\mu^{(0)}$ ill. $\varphi_v^{(t)}$ többszörösei képezik; írható tehát:

$$E_0(I_\mu)f = Q(f, \varphi_\mu^{(0)}) \cdot \varphi_\mu^{(0)},$$

$$E_t(J_v)f = Q(f, \varphi_v^{(t)}) \cdot \varphi_v^{(t)}.$$

Számítsuk ki most $[E_0(I_\mu), E_t(J_v)]$ -t a $\varphi_1^{(0)}, \varphi_2^{(0)}, \dots$ teljes ortonormált rendszer felhasználásával:

$$[E_0(I_\mu), E_t(J_v)] = [E_t(J_v)E_0(I_\mu)] = \sum_{q=1}^{\infty} Q(E_t(J_v)E_0(I_\mu)\varphi_q^{(0)}) =$$

$$= Q(E_t(J_v)\varphi_\mu^{(0)}) = Q(Q(\varphi_\mu^{(0)}, \varphi_v^{(t)}) \cdot \varphi_v^{(t)}) = |Q(\varphi_\mu^{(0)}, \varphi_v^{(t)})|^2;$$

ez éppen a Born-féle kifejezés [ugyanis

$$c_{\mu v}(t) = [Q(\varphi_v^{(t)}, \varphi_\mu^{(0)}) = \overline{Q(\varphi_\mu^{(0)}, \varphi_v^{(t)})}].$$

Összefoglalás

XV. Amint látjuk, tárgyalásmódunk oly módon adja vissza a történések kettős (kontinuus-diszkontinuus) természetét, hogy minden mennyiséghez ill. az annak megfelelő szimmetrikus operátorhoz az 1 egységnek $E(I', I'') = E(I'') - E(I')$ ($I' \leq I''$) egységoperátorok szerint való valamely felbontását rendeljük hozzá.

Az $E(I)$ függvény (abban az értelemben, ahogy az egységoperátorokra értendő) monoton nő; ez a monotonia mindazon tulajdonságokat mutathatja, amelyeket az atomok esetében megismertünk: növekedése 0-tól (ha $I = -\infty$) 1-ig (ha $I = \infty$) történhet egyes ugrásokban (kvantált állapotok) vagy folytonosan (kvantálatlan állapotok), és közben bizonyos intervallumokban állandó is lehet a függvény (tiltott állapotok). Azt a kijelentést, hogy „az a mennyiség, amely R -hez tartozik, az $I' < x \leq I''$ közbe eső értéket vesz fel”, számítási skémánkban az $E(I', I'')$ egységoperátor képviseli.

Ha több kijelentést teszünk: „az R_1, R_2, \dots, R_i mennyiségek értékei az I_1, I_2, \dots, I_i közt fekszenek, az S_1, S_2, \dots, S_j mennyiségek értékei pedig a J_1, J_2, \dots, J_j közt fekszenek”, úgy az

$$E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i) \cdot F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J_j)$$

szorzatot kell képeznünk (ebben az átvitt értelemben érvényes a valószínűségek szorzási törvénye!); ekkor ennek

$$\begin{aligned} & [E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i) \cdot F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J_j)] = \\ & = [E_1(I_1) \cdot \dots \cdot E_i(I_i), F_1(J_1) \cdot \dots \cdot F_j(J_j)] \end{aligned}$$

abszolútérték-négyzete adja meg mindezek együttes fennállásának (relatív) valószínűségét. Mint láthatjuk, ebben a skémában az ok-okozat szétválasztásának egyáltalán nem kell *a priori* érvényesülnie; azt a felcserélhetőségi viszonyok utólag önként elvégzik: ha egyrésről az $E_\mu(I_\mu)$ operátorok, másrésről az $F_\nu(J_\nu)$ operátorok egymás között valamennyien felcserélhetők úgy a szorzat automatikusan e két csoportra esik szét. Az egyes csoportokon belül a tényezők sorrendje közömbös (XIII. § α), ugyanígy a két csoportnak mint egésznek a sorrendje XXIII. § β) ez a két csoport az mely okként és okozatként jelölhető meg.

Természetesen a felcserélhetőségi viszonyoknak az ok-okozat szétválasztást nem kell feltétlenül egyértelműen rögzíteniök: ha pl. valamelyik E_μ mindegyik E_μ -vel s ugyanígy mindegyik F_ν -vel felcserélhető, úgy tetszés szerint hozzá lehet számítani az egyik vagy a másik csoporthoz.

Másrésről azonban a felcserélhetőségi viszonyok bizonyos fajta szétválasztásokat eleve kizárnak: a felcserélhető mennyiségek esetében általában meglevő abszolúte éles kauzális kapcsolatot (vö. a XIV. § második példájával) nem erőszakolhatjuk ki minden esetben azért, hogy (a klasszikus mechanika eljárásának megfelelően) valamennyi koordinátát és azok konjugált impulzusait megfigyeljük és azokat együttesen az „ok” szerepébe helyezzük, azaz R_μ -nek tekintjük. (Dirac mutatott rá először arra, hogy ez az eljárás nem megengedett.) Valamely koordináta és az ahhoz konjugált impulzus ugyanis, mint ismeretes, nem felcserélhetők

$\left(q_\mu \dots \text{és} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \dots \right)$ ezek tehát mindenkor automatikusan különválnak: az egyiknek oknak, a másiknak okozatnak (ill. megfigyeltnek és az elmélet által előre megadottnak) kell lennie. Még ha mindent meg is figyeltünk, hasztalan: a kvantummechanika (mely jóformán mindent magában foglal, ami biztosat ma az atomokról tudunk) ezzel a kérdéssel egyáltalán nem foglalkozik!

Végezetül hadd említsük meg, hogy az előzőekben mondottakkal módszerünk alkalmazhatósága még egyáltalán nem merült ki. Szeretnénk erre még más alkalommal visszatérni, éppúgy mint bizonyos, itt még elintézetlenül maradt formális matematikai kérdésekre.

Függelék

1. Legyen w egy sajátérték, x_1, x_2, \dots pedig egy sorozat, melyet H a w -szeresésbe transzformál. Ha e sorozatot S^{-1} alkalmazása az y_1, y_2, \dots sorozatba viszi át, úgy feltételünk egyet jelent azzal, hogy $S^{-1}HS$ az y_1, y_2, \dots sorozatot a w -szeresésbe transzformálja.

$S^{-1}HS = W$ azonban az y_1, y_2, \dots sorozatot a w_1y_1, w_2y_2, \dots sorozatba viszi át; tehát y_μ -nek 0-val kell egyenlőnek lennie, hacsak $w_\mu = w$ nem teljesül. Azaz: ha w a w_1, w_2, \dots értékek mindegyikétől különbözik, úgy valamennyi y_μ , s ezzel együtt minden x_μ zérussal egyenlő, azaz w nem sajátérték. Ha ezzel szemben w bizonyos w_μ -kkel egyenlő — mondjuk $w_{\mu'}$ -vel, $w_{\mu''}$ -vel, ... — úgy $y_{\mu'}, y_{\mu''}, \dots$ tetszőleges lehet (az összes többi $y_\mu = 0$). Az x_1, x_2, \dots sorozat az y_1, y_2, \dots sorozatból S -sel való transzformáció útján áll elő, tehát

$$x_\mu = \sum_{\nu=1}^{\infty} s_{\mu\nu} y_\nu = s_{\mu\mu'} y_{\mu'} + s_{\mu\mu''} y_{\mu''} + \dots$$

Azaz: x_1, x_2, \dots ténylegesen tetszőleges lineáris kombinációja lehet az $s_{1\mu'}, s_{2\mu'}, \dots, s_{1\mu''}, s_{2\mu''}, \dots$ oszlopoknak, és semmi más.

2. Megmutatjuk, hogy az Ω -n definiált összes, véges $\int_{\Omega} |f(P)|^2 dv$ -vel rendelkező $f(P)$ függvények \mathfrak{H} tere Ω (Ω valamely k -dimenziós felület az l -dimenziós térben, P tetszőleges pont az Ω felületen, dv a differenciális elem Ω -n) eleget tesz a IV. § A.—E. feltételeinek. A közös \mathfrak{H}_0 Hilbert-térre (az összes véges $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ négyzetösszegű x_1, x_2, \dots sorozatok) felesleges elvégezni a bizonyítást; az V. § szerint ugyanis minden tér, mely az A.—E. tulajdonságú, rendelkezik \mathfrak{H}_0 tulajdonságaival, következésképpen \mathfrak{H}_0 rendelkezik az A.—E. tulajdonságokkal.

Az af és $f+g$ operációk definíciója nyilvánvaló; az, hogy f -fel együtt af is \mathfrak{H}_0 -hoz tartozik, világos; az f, g elemekkel együtt $f+g$ is \mathfrak{H} -hoz tartozik a [16] megjegyzés egyenlőtlensége folytán. $Q(f, g)$ -t, mint azt a III. §-ban megindokoltuk, az $\int_{\Omega} f(P)g(P)dv$ alakban kell definiálnunk. Az \mathfrak{H} minden f, g elempárjára véges szám, hiszen

$$|f(P)g(P)| \leq \frac{1}{2}|f(P)|^2 + \frac{1}{2}|g(P)|^2$$

és $\int_{\Omega} |f(P)|^2 dv, \int_{\Omega} |g(P)|^2 dv$ mindegyike véges.

Térjünk rá most az A.—E. feltételekre!

A., B.: Nyilvánvalóan teljesülnek.

C.: Válasszunk Ω -n k számú, közös ponttal nem rendelkező tartományt: $\mathfrak{M}_1, \mathfrak{M}_2, \dots, \mathfrak{M}_k$; $f_p(P)$ legyen $=1$ ill. 0 aszerint, hogy P hozzátartozik-e \mathfrak{M}_p -hez vagy sem ($p=1, 2, \dots, k$). Az f_p -k ($p=1, 2, \dots, k$) lineárisan függetlenek; ha ugyanis

$$a_1 f_1 + a_2 f_2 + \dots + a_k f_k = 0$$

úgy speciálisan \mathfrak{M}_p -ben is

$$a_1 f_1(P) + a_2 f_2(P) + \dots + a_k f_k(P) = 0,$$

azaz $a_p = 0$ ($p=1, 2, \dots, k$).

D.: Ezen tulajdonság általános bizonyítása minden Ω felületre nem lehetséges könnyen anélkül, hogy részletesebben ne foglalkoznánk az általános felület és az ún. Lebesgue-féle mérték pontos fogalmával [37]. Ezt itt mellőzni kívánjuk, és csupán két jellemző esetben szeretnénk megadni \mathfrak{H} -ban mindenütt sűrű f_1, f_2, \dots sorozatokat.

Először legyen Ω a

$$0 \leq x_v \leq 1 \quad (v = 1, 2, \dots, n)$$

egyenlőtlenséget kielégítő x_1, x_2, \dots, x_n pontok alkotta „ n -dimenziós kocka”; \mathfrak{H} ekkor az összes, Ω -n értelmezett, véges abszolútértéknégyzet-integrállal rendelkező (komplex) f függvény tere. Az ilyen $f(P) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ függvények Fourier-szerint sorbafejthetők:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{r_1, r_2, \dots, r_n = -\infty}^{\infty} c_{r_1 r_2 \dots r_n} e^{2\pi i(r_1 x_1 + r_2 x_2 + \dots + r_n x_n)}.$$

A

$$\sum_{r_1, r_2, \dots, r_n = -N}^N c_{r_1 r_2 \dots r_n} e^{2\pi i(r_1 x_1 + r_2 x_2 + \dots + r_n x_n)}$$

részletösszeg $N \rightarrow \infty$ esetén normában f -hez konvergál [38].

A \mathfrak{H} tér bármely f eleméhez tetszőlegesen közel található tehát

$$\sum_{r_1, r_2, \dots, r_n = -N}^N c_{r_1 r_2 \dots r_n} e^{2\pi i(r_1 x_1 + r_2 x_2 + \dots + r_n x_n)}$$

alakú függvény, s így található olyan is, melynek $c_{r_1 r_2 \dots r_n}$ együtthatói reacionális számok. Ezek azonban, mint ismeretes, sorozat alakjában írhatók fel [39].

Legyen másodszer Ω az összes x_1, x_2, \dots, x_n pont alkotta „(valós) n -dimenziós tér”; \mathfrak{H} ennek feleljen meg. Legyen $\varphi(x)$ valamely (differenciálható) függvény, mely a $0, 1$ intervallumot a $-\infty, \infty$ intervallumra képezi le; $\psi(y)$ legyen ennek inverze $\left(\text{pl. } \ln \frac{x}{1-x} \text{ és } \frac{e^y}{e^y + 1}\right)$.

Ekkor általánosságban fennáll:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = \int_0^1 \dots \int_0^1 f(\varphi(u_1), \dots, \varphi(u_n)) \varphi'(u_1) \cdot \dots \cdot \varphi'(u_n) du_1 \dots du_n;$$

következésképpen csak az f_1, f_2, \dots függvényeket kell úgy választanunk, hogy az első példa \mathfrak{H} terében mindenütt sűrűn feküdjenek; ekkor a

$$g_\mu(x_1, \dots, x_n) = \frac{f_\mu(\psi(x_1), \dots, \psi(x_n))}{\varphi'(\psi(x_1)) \cdot \dots \cdot \varphi'(\psi(x_n))}$$

képlettel értelmezett g_1, g_2, \dots függvények most vizsgált példánkban nyilvánvalóan mindenütt sűrűn fekszenek.

E.: Legyen f_1, f_2, \dots a \mathfrak{H} térbe tartozó függvények egy sorozata, és minden $\varepsilon > 0$ számhoz tartozzék olyan $N = N(\varepsilon)$, hogy $N \leq m \leq n$ fennállásából

$$\int_{\Omega} |f_m(P) - f_n(P)|^2 dv \leq \varepsilon$$

következik.

Válasszunk egy monoton növekedő N_1, N_2, \dots számsorozatot oly módon, hogy

$$N_v \geq N\left(\frac{1}{8^v}\right)$$

legyen. Ekkor

$$\int_{\Omega} |f_{N_{v+1}}(P) - f_{N_v}(P)|^2 dv \leq \frac{1}{8^v}$$

Azon P pontok, amelyekben

$$|f_{N_{v+1}}(P) - f_{N_v}(P)| \leq \frac{1}{2^v}$$

olyan felületdarabot képeznek, melynek mértéke (felszíne [40]) $\leq \frac{1}{2^v}$. Azoknak tehát, amelyekre

$$|f_{N_{v+1}}(P) - f_{N_v}(P)| \leq \frac{1}{2^v},$$

$$|f_{N_{v+2}}(P) - f_{N_{v+1}}(P)| \leq \frac{1}{2^v},$$

$$|f_{N_{v+3}}(P) - f_{N_{v+2}}(P)| \leq \frac{1}{2^{v+2}},$$

nem áll fenn,

$$\leq \frac{1}{2^v} + \frac{1}{2^{v+1}} + \frac{1}{2^{v+2}} + \dots = \frac{1}{2^{v-1}}$$

a mértékük. Azonban mindenütt, ahol a fenti egyenlőtlenségek érvényesek, az $f_{N_1}(P), f_{N_2}(P), \dots$ sorozat konvergens; azok a pontok, ahol nem konvergens, olyan felületdarabot képeznek, amelynek mértéke $\leq \frac{l}{2^{v-1}}$. Ez minden v -re fennáll, e felületdarab mértéke tehát 0.

Az $f_{N_v}(P)$ sorozat határértéke mindenütt létezik tehát (legfeljebb egy 0 mértékű halmazt kivéve), nevezzük ezt $f(P)$ -nek.

Ha $m \geq N = N(\varepsilon)$, úgy $N_v \geq m$ esetén, azaz minden N_v -re, legfeljebb véges számút kivéve

$$\int_{\Omega} |f_m(P) - f_{N_v}(P)|^2 dv \leq \varepsilon;$$

v -vel tarthatunk tehát ∞ -hez:

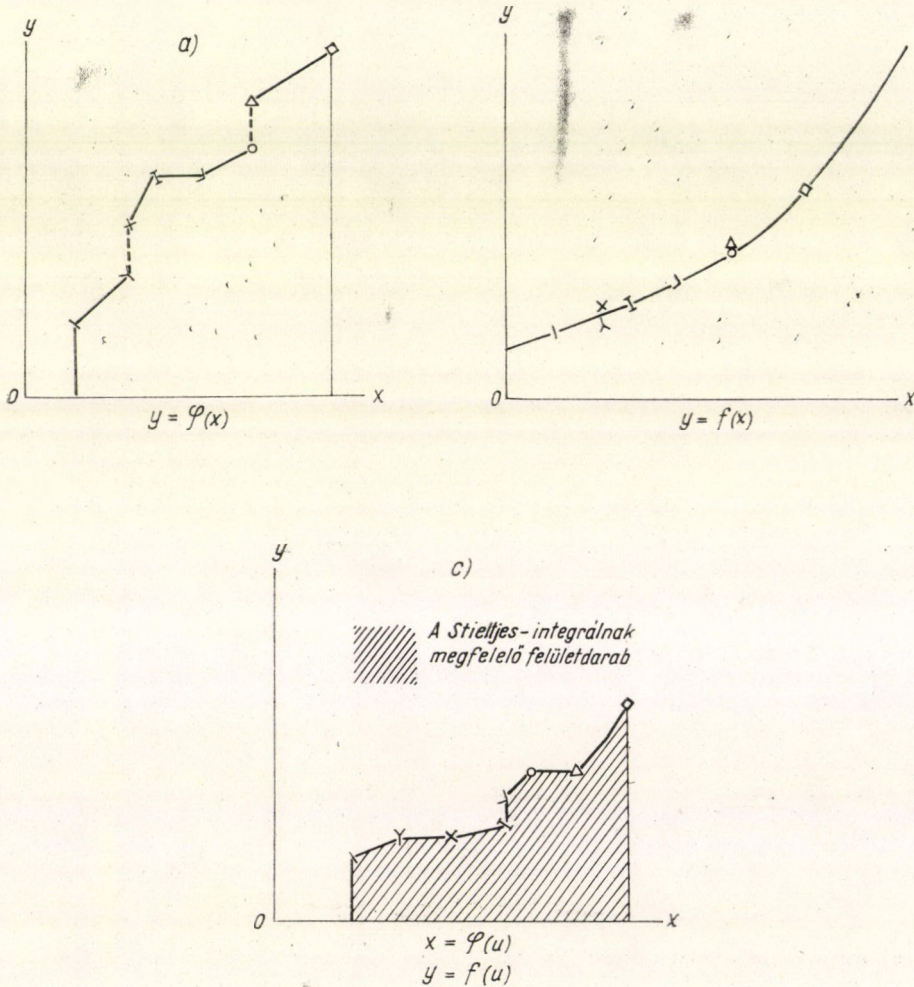
$$\int_{\Omega} |f_m(P) - f(P)|^2 dv \leq \varepsilon.$$

Azaz: f hozzátartozik \mathfrak{H} -hoz, és az f_1, f_2, \dots sorozat f -hez tart.

3. Az

$$\int_a^b f(x) d\varphi(x)$$

Stieltjes-integrál akkor van értelmezve, ha a, b véges vagy végtelen intervallum, $f(x)$ ebben az intervallumban (még a -ban és b -ben is!) folytonos függvény, $\varphi(x)$ pedig ugyanott monoton növekedő (még a -ban és b -ben is véges) függvény, vagy két



1 a b c ábra

ilyen függvény különbsége (korlátos variációjú függvény). A Stieltjes-integrált — hasonlóan a Riemann-integrálhoz — a

$$\sum_{n=1}^N f(x'_n)(\varphi(x_n) - \varphi(x_{n-1}))$$

$$(a = x_0 \leq x'_1 \leq x_1 \leq x'_2 \leq x_2 \leq \dots \leq x_{N-1} \leq x'_{N-1} \leq x_N = b)$$

kifejezések határértékeként értelmezzük, az a, b intervallum tetszőlegesen finom x_0, x_1, \dots, x_n felosztása esetén [41].

Anélkül, hogy részletekbe bocsátkoznánk, a Stieltjes-integrál következő szemléltetését adjuk meg (monoton φ -re):

Rajzoljuk meg az x, y -síkbán az

$$x = \varphi(u) \quad (a \leq u \leq b)$$

$$y = f(u)$$

görbét (ha x egy „lyukba” esik, mert azt $\varphi(u)$ diszkontinuuson átugorja, úgy a szomszédos $f(u)$ függvényértékeket vízszintesen kötjük össze); ekkor

$$\int_a^b f(u) d\varphi(u)$$

az ezen görbe, az x -tengely, és az $x = \varphi(a)$ és $x = \varphi(b)$ abszcisszáik közé eső felületdarab felszíne (vö. a — c . ábra).

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

[1] Az említett szerzők több dolgozata az Ann. d. Physik, Zeitschr. für Physik, Proc. of the Royal Soc. 1926/27 évfolyamaiban.

[2] A kvantummechanika tipikus (Schrödinger-féle) differenciál-egyenlete a

$$H\psi = \lambda\psi$$

alakú, ahol H egy differenciáloperátor, λ a sajátértékek-paraméter, ψ pedig a „hullámfüggvény”, melyre bizonyos regularitási és peremérték-feltételeket írunk elő; ezek folyományaképpen áll elő a sajátértékfeladat.

[3] Schrödinger, Ann. der Physik, 79/8, 734 (1926).

[4] Hellinger, Inaugural-Dissertation 4. § (Göttingen 1907). Ezen feltétel szükségessége közvetlenül nyilvánvaló: transzformációkon a spektrum invariáns marad, s egy átlós mátrixnak csak diszkontinuus spektruma van (az átlós elemek a sajátértékek).

[5] Schrödinger, Ann. der Physik, 79/4, 367 (1926).

[6] Vö. főként: Dirac, Proc. of the Royal Soc. 113, 621 (1927).

[7] Zeitschr. für Physik, 40, 11/12, 809 (1927)

[8] Az $\{\alpha_{\mu\nu}\}$ transzformációs mátrix — komplex — ortogonalitását a

$$\sum_{\varrho=1}^{\infty} \alpha_{\mu\varrho} \bar{\alpha}_{\nu\varrho} = \begin{cases} 1, & \text{ha } \mu = \nu, \\ 0, & \text{ha } \mu \neq \nu, \end{cases}$$

képlet fejezi ki; ez a transzformáció változatlanul hagyja a

$$\sum_{\varrho=1}^{\infty} x_{\varrho} \bar{y}_{\varrho}$$

„Hermite-féle egységformát”. A matematikai irodalomban a komplex ortogonalitás megjelölésére az „unitér” elnevezés használatos.

[9] Vö. pl. Born, Probleme der Atomdynamik, 86 old. (Berlin 1926).

[10] Schrödinger, Ann. der Physik, 79/4, 361; 79/6, 489 (1926).

[11] A

$$|h_{\mu\nu}x_\nu| \leq \frac{1}{2}|h_{\mu\nu}|^2 + \frac{1}{2}|x_\nu|^2$$

egyenlőtlenség folytán még az is igaz, hogy a $\sum_{\nu=1}^{\infty} h_{\mu\nu}x_\nu$ sor abszolút konvergens.

[12] A végtelen mátrixok ill. bilineáris alakok elméletét lényegében Hilbert alapozta meg, teljes mértékben tisztázva a viszonyokat (különösen ami a sajátértékprobléma megoldását illeti) a teljesen folytonos bilineáris alakok osztályában, és a korlátos bilineáris alakoknak az előbbinél általánosabb osztályában is. (Vö. Gött. Nachrichten, Math. Phys. Klasse, 1906, 159—227. old.)

A kvantummechanika matematikai tisztázatlanságának és nehézségeinek nagy része onnan ered, hogy már a legegyszerűbb, benne alapvető operátorok (mátrix-bilineáralakok) nem a korlátos operátorok Hilbert által elintézett osztályához tartoznak.

Azt, hogy miképpen oldható meg egyértelműen tetszőleges operátorok sajátértékfeladata, tehát a nem-korlátosaké is, a szerző mutatta meg legújabbán (Math. Ann.). Természetesen ebben a munkában is pontosan meg kell majd vizsgálnunk a nem-korlátos operátorok sajátértékfeladatának megfogalmazását.

[13] A hidrogén atom alapállapotában (Schrödinger terminológiájában $n=1, l=0$) a megoldás

$$\psi(x, y, z) = e^{-\sqrt{x^2+y^2+z^2}};$$

ez az $x=y=z$ pontban a kúpéhoz hasonló csúcsponttal rendelkezik.

[14] Több dolgozat a Proc. of the Roy. Soc. 1926/27. évfolyamaiban.

[15] Gött. Nachrichten, Math.-Phys. Klasse, 1907, 116—122 old.

[16] Az, hogy $\sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu|^2$, $\sum_{\mu=1}^{\infty} |d_\mu|^2$ ill. $\int_{\Omega} |f|^2 dv$, $\int_{\Omega} |g|^2 dv$ véges voltából következik, hogy

$\sum_{\mu=1}^{\infty} |c_\mu + d_\mu|^2$, ill. $\int_{\Omega} |f+g|^2 dv$ is véges (azaz: hogy véges $Q(f)$, $Q(g)$ mellett $Q(f+g)$ is véges), minden további nélkül adódik az

$$|u+v|^2 \leq |u+v|^2 + |u-v|^2 = 2|u|^2 + 2|v|^2$$

összefüggésből.

[17] Könnyen meggyőződhetünk róla, hogy

$$Q(af+bg) = a^2Q(f) + ab[Q(f, g) + Q(g, f)] + b^2Q(g) = a^2Q(f) + 2ab\Re Q(f, g) + b^2Q(g)$$

(itt a, b valós állandók; \Re és \Im a komplex szám valós, ill. képzetes részét jelenti). A bal oldal mindenkor ≥ 0 , a jobb oldal pedig kvadratikusan alak a -ban és b -ben; diszkriminánsa tehát ≤ 0 :

$$[\Re Q(f, g)]^2 - Q(f) \cdot Q(g) \leq 0, \quad |\Re Q(f, g)| \leq \sqrt{Q(f) \cdot Q(g)}.$$

Ha itt f -et $e^{i\varphi}f$ -fel helyettesítjük (φ valós állandó), úgy a jobb oldal változatlan marad, a bal oldal pedig az

$$|\Re\{e^{i\varphi}Q(f, g)\}| = |\cos\varphi\Re Q(f, g) - \sin\varphi\Im Q(f, g)|$$

kifejezésbe megy át. Minthogy ennek maximuma

$$\sqrt{[\Re Q(f, g)]^2 + [\Im Q(f, g)]^2} = |Q(f, g)|,$$

ténylegesen fennáll:

$$|Q(f, g)| \leq \sqrt{Q(f) \cdot Q(g)}.$$

Fennáll továbbá:

$$Q(af) = a\bar{a}Q(f) = |a|^2Q(f), \quad \sqrt{Q(af)} = |a|\sqrt{Q(f)},$$

és

$$Q(f+g) = Q(f) + Q(f, g) + Q(g, f) + Q(g) = Q(f) + 2\Re Q(f, g) + Q(g) \leq$$

$$\leq Q(f) + 2\sqrt{Q(f) \cdot Q(g)} + Q(g) = (\sqrt{Q(f)} + \sqrt{Q(g)})^2,$$

$$\sqrt{Q(f+g)} \leq \sqrt{Q(f)} + \sqrt{Q(g)}.$$

[18] A legutolsónak említett összefüggésből következik ugyanis a mindenfajta távolságra érvényes (f, h) távolsága $\equiv (f, g)$ távolsága $+(g, h)$ távolsága alapposztulátum. Az általunk használt $\sqrt{Q(f-g)}$ távolság \mathfrak{H}_0 -ban és \mathfrak{H} -ban (ahol ismerjük Q -t)

$$\sqrt{\sum_{n=1}^{\infty} |x_n - y_n|^2} \quad \text{ill.} \quad \sqrt{\int_{\Omega} |f - g|^2 dv},$$

ami a közönséges euklideszi tér távolságfogalmának értelemszerű általánosítása.

[19] Ez \mathfrak{H} -ban jelent konvergenciát! Ha pl. \mathfrak{H} -nak valamely \mathfrak{H} folytonos realizációját vizsgáljuk (\mathfrak{H} az Ω tartományban értelmezett, véges $\int_{\Omega} |f|^2 dv$ -vel rendelkező összes f függvény tere),

úgy ez ott nem pontonkénti konvergenciát, hanem normában való konvergenciát jelent!

[20] Ez a következőképpen végezhető el:

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= g_1, & \varphi_1 &= \frac{1}{\sqrt{Q(\gamma_1)}} \gamma_1, \\ \gamma_2 &= g_2 - Q(g_2, \varphi_1) \varphi_1, & \varphi_2 &= \frac{1}{\sqrt{Q(\gamma_2)}} \gamma_2, \\ \gamma_3 &= g_3 - Q(g_3, \varphi_1) \varphi_1 - Q(g_3, \varphi_2) \varphi_2, & \varphi_3 &= \frac{1}{\sqrt{Q(\gamma_3)}} \gamma_3, \\ &\dots\dots\dots \end{aligned}$$

A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ elemek láthatóan ugyanazt a lineáris sokaságot feszítik ki, mint a g_1, g_2, \dots elemek, és ortonormáltak.

[21] A második feltétel ezt mondja: $Q(f) \leq 1$ fennállásából következik $Q(Tf) \leq C$ (itt C állandó). Ebből

$$Q(Tf) \leq CQ(f),$$

$$Q(Tf - Tg) \leq CQ(f - g)$$

következik, azaz a folytonosság. Megfordítva: folytonos T -hez található olyan $\varepsilon > 0$, hogy $Q(f) \leq \varepsilon$ fennállásából $Q(Tf) \leq 1$ következik; innen könnyen adódik a következtetés, miszerint $Q(f) \leq 1$ esetén $Q(Tf) \leq \frac{1}{\varepsilon}$.

[22] Ennek jelentőségét a következő 2 példán tesszük a magunk számára világossá:

Ω legyen a $0, 1$ szakasz, T a differenciálás. Tf nincs mindenütt értelmezve (nem minden $f(x)$ differenciálható), azok az f -ek azonban, amelyekre értelmezve van, mindenütt sűrűn fekszenek: hiszen bármely függvény már polinomok (azaz differenciálható függvények) segítségével tetszőlegesen approximálható (en moyenne).

Ω legyen a $-\infty, +\infty$ szakasz, T a szorzás x -szel. Tf nem mindenütt van értelmezve ($\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ lehet véges anélkül, hogy $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |f(x)|^2 dx$ az volna), azok az f -ek azonban, amelyekre értelmezve van, mindenütt sűrűn fekszenek: ilyen minden f , mely egy (tetszőlegesen nagy, de véges) intervallumon kívül eltűnik.

[23] Ezt a szót az analóg bilineáris alakok Hilbert-féle megjelölése: az „egységforma” mintájára képeztük.

[24] Ez kézenfekvővé teszi az ellenvetést, hogy \mathfrak{H}_0 ill. \mathfrak{H} (azaz \mathfrak{H}) meghatározásakor önkényesen túl keveset engedtünk meg; mondjuk \mathfrak{H} -nál maradva, talán olyan függvényeket is meg kellene engednünk, amelyekre $\int_{\Omega} |f(P)|^2 dv$ végtelen.

Ez az ellenvetés azonban nem állja meg a helyét: meg fogjuk mutatni, hogy a kvantummechanikában egyáltalán nem a sajátfüggvények, hanem a folytonos spektrum más jellemvonásai a jelentőségek, melyek leírására a mi \mathfrak{H} térünk a legalkalmasabb keretet nyújtja. Ezen felül az még nem is

volna elég, ha valamennyi $f(P)$ függvényt megengednénk; ezt két példán kívánjuk megvilágítani: egyikük esetében segít a függvényter említett kiterjesztése, a másik esetében azonban nem.

Először: Ω legyen a $-\infty, \infty$ intervallum, T pedig a kvantummechanikából jól ismert

$$p = \frac{h}{2\pi i} \frac{d}{dx} \dots$$

szimmetrikus operátor. Mint azonnal látható, a spektrum az egész $-\infty, \infty$ intervallum, és az l sajátértékhez az $e^{2\pi i \frac{l}{h} x}$ sajátfüggvény tartozik. Minthogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left| e^{2\pi i \frac{l}{h} x} \right|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

az nem tartozik \mathfrak{H} -hoz.

Másodszor: Ω legyen ugyanaz mint az előbb, T pedig legyen az ugyancsak igen fontos

$$q = x \dots$$

szimmetrikus operátor. Nyilvánvaló (s azt a X. §-ban egzaktul meg fogjuk alapozni), hogy ismét minden $l = -\infty$ -től ∞ -ig, sajátérték, csak hogy a sajátfüggvénynek minden $x \neq l$ mellett el kellene tűnnie. Minthogy az ilyen függvény minden integrálban ugyanazt a szerepet tölti be, mint a 0, azt 0-nak kell tekintenünk; azaz sajátfüggvények nem találhatók. (Természetesen megtehetjük, hogy a Dirac-féle $\delta(x-l)$ -et — vö. I. § § — tekintjük sajátfüggvénynek, az azonban „improprius”.)

Látjuk tehát: nem határozható meg minden további nélkül olyan matematikailag kifogásolhatatlan függvényosztály, amelyben a folytonos spektrumot közvetlenül tárgyalhatnánk.

[25] Az, hogy $\tilde{E}(l; x|y)$ egységforma, közvetlen számolással nehézség nélkül verifikálható abból kiindulva, hogy az a

$$\Sigma L(x) \overline{L(y)}$$

alakú, ahol az $L(x)$ -ek x_1, x_2, \dots, x_k egymásra ortogonális és normált lineáris kifejezései.

[26] Lényegében ebben az alakban oldotta meg a korlátos bilineáris alakok sajátértékproblémáját Hilbert. Minden esetre következetesen mellőzzük a pontspektrumnak a folytonos spektrumtól való, az irodalomban szokásos elválasztását.

Egyébként a

$$T = \int_{-\infty}^{\infty} l dE(l)$$

operátor természetesen nem mindig értelmes kifejezés; meg lehet mutatni, hogy Tf akkor létezik (\mathfrak{H} -ban), ha az

$$\int_{-\infty}^{\infty} l^2 dQ(E(l)f)$$

szám véges.

[27] Valós szimmetrikus operátorok esetére a szerzőnek sikerült megmutatnia, hogy mindenkor egy és csak egy megoldás létezik; komplex (hermitikus-) szimmetrikus operátorokra ugyanez várható, azonban a bizonyítás útjában bizonyos nehézségek állnak. Vö. a szerző [12] alatt említett munkájával (Math. Ann.).

[28] Azt, hogy a \mathfrak{H} térhez nem tartozó sajátfüggvényekből (melyekre tehát $\int_{\Omega} |\varphi|^2 dv$ végtelen) miképpen állnak elő \mathfrak{H} -hoz tartozó lineáris kombinációk, a [24] alatt közölt első példa mutatja:

Az $e^{2\pi i \frac{l}{h} x}$ sajátfüggvények nem négyzetesen integrálhatók, az

$$\int_{l_1}^{l_2} e^{2\pi i \frac{l}{h} x} dl = \frac{h}{2\pi i l} \left(e^{2\pi i \frac{l_2}{h} x} - e^{2\pi i \frac{l_1}{h} x} \right) \cdot \frac{1}{x}$$

ineáris kombinációk azonban igen; itt az utolsó tényező, az $1/x$ folyománya, hogy négyzetesen integrálható függvényt nyerünk.

[29] Stieltjes-integrálokra fennáll az

$$\int_A^B u(l) d \left[\int_A^l v(l') dw(l') \right] dl = \int_A^B u(l) v(l) dw(l)$$

összefüggés; ez megfelel a közönséges integrálás esetében érvényes

$$\int_A^B u(l) \frac{d}{dl} \left[\int_A^l v(l) dl \right] dl = \int_A^B u(l) v(l) dl$$

összefüggésnek.

[30] Kiválasztva azon mindenütt sűrű halmazból, amelyen értelmezve van, egy mindenütt sűrű f_1, f_2, \dots sorozatot, és alkalmazva a VI. § 6. tételét, nyerjük a kívánt ψ_1, ψ_2, \dots ortonormált rendszert.

[31] A

$$\sqrt{a_1 b_1} + \dots + \sqrt{a_n b_n} \leq \sqrt{(a_1 + \dots + a_n)(b_1 + \dots + b_n)}$$

egyenlőtlenség, mint ismeretes, tetszőleges nemnegatív a_n, b_n mellett fennáll.

[32] Legyen f_1, f_2, \dots ill. g_1, g_2, \dots E belsejében ill. külsejében mindenütt sűrű sorozat. A VI. § 6. tételének alkalmazásával képezzük ezekből a $\varrho_1, \varrho_2, \dots$ és $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ ortonormált rendszereket. A VIII. § 6. tétele szerint $\varrho_1, \sigma_1, \varrho_2, \sigma_2, \dots$ is ortonormált rendszer, és XIII. § 5. tétele szerint mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszít ki, azaz: teljes.

[33] Vö. pl. [3].

[34] Vö. pl. *Jordan* [7] alatt idézett munkáját.

[35] Ez a példa *L. Nordheim* egy megjegyzésének köszönhető.

[36] *Zeitschr. für Physik*, **38**, 803; **40**, 167 (1926).

[37] Vö. pl. *Carathéodory*, *Vorlesungen über reelle Funktionen*. Berlin—Leipzig 1918, Kap. V—IX.

[38] A [12] alatt említett munkában megadom egy \mathfrak{H} -ban mindenütt sűrű sorozat általános közvetlen konstrukcióját.

[39] Mint ismeretes, véges sok racionális szám bármilyen komplexusa (és itt ilyenről van szó) sorozat alakjába írható.

[40] Felszín alatt voltaképpen a Lebesgue-féle mérték értendő (vö. [37]).

[41] *Stieltjes*, *Recherches sur les fractions continues*, *Annales de la Faculté des sciences de Toulouse*, 1894/95, VI. fej. Rövid tárgyalás található pl. a következő műben: *Carleman*, *Équations Intégrales à noyau réel singulier*, Uppsala 1923, 7—9. old.

AZ AKADÉMIAI KIADÓ GONDOZÁSÁBAN JELENT MEG:

Szénássy Barna

KÖNIG GYULA
(1849—1913)

Hazánkat ma a matematika nagyhatalmai közé sorolják. König Gyulának nem kis része van abban, hogy azzá lehettünk. Önálló vizsgálódásai átfogták az akkori matematika csaknem egész területét. Legmaradandóbbak azok a gondolatai, melyek a végtelen kicsiny (az analízis) és a végtelen nagy (a halmazelmélet) tárgykörébe tartoznak. A kötet a nagy magyar matematikusnak, a matematika filozófusának életét és munkásságát dolgozza fel.

142 oldal

Kötve 25,— Ft

M. Zemplén Jolán

A MAGYARORSZÁGI FIZIKA TÖRTÉNETE
A XVIII. SZÁZADBAN

A fizika szaktudománnyá válik

A szerző eddig ismeretlen vagy kevésbé feltárt kézírásos dokumentumok alapján, a legjelentősebb iskolák fizikaoktatását, valamint a legkiemelkedőbb magyarországi fizikusok munkásságát bemutatva tárgyalja a fizika történetének azt a korszakát, amelyben az ún. klasszikus fizika elterjed és megszilárdul, és a természettudomány többi ágával együtt önálló, a filozófiától független szaktudománnyá válik.

495 oldal

124 ábra

Kötve 100,— Ft



AKADÉMIAI KIADÓ
BUDAPEST

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1967. II. 13. — Példányszám: 550 — Terjedelem: 9,45 (A/5) ív

67-5531 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetések, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

Kiss Dezső: Az (n , gamma)-reakciók kísérleti tanulmányozása 213

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

Neumann János: A kvantummechanika matematikai megalapozása 271

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leylásztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levelezéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KISINTENZITÁSÚ NEUTRONFORRÁSOK ABSZOLÚT INTENZITÁSÁNAK MÉRÉSE*

SZABÓ JÓZSEF

Kossuth Lajos Tudományegyetem Kísérleti Fizikai Intézete, Debrecen

KOLTAY EDE

Magyar Tudományos Akadémia Atommag Kutató Intézete, Debrecen

A KMnO_4 oldatos fizikai integrációs módszer módosításával 10^3 n/sec-ig csökkentettük a módszerrel mérhető neutronintenzitások alsó határát.

1. Bevezetés

A neutronforrások abszolút intenzitásának meghatározására szolgáló módszerek között fontos helyet foglal el a fizikai integrációs módszer. Lényege, hogy a mérendő forrásból emittált — rendszerint bonyolult spektrumú — neutronokat nagyméretű moderátorban termalizáljuk, s termikus energiaszinten detektáljuk a moderátorban oldott detektor anyagban (rendszerint mangán) befogásuk során keltett mesterséges radioaktivitás mérésével. Tekintettel arra, hogy a detektálás termikus szinten történik, megfelelő moderátorméret mellett a módszer érzékenysége a neutronspektrumtól független; energiafüggetlen neutrondetektorként alkalmazható. A fizikai integrációs eljárás alapjaival kapcsolatban korábbi közleményünkre [1] utalunk; alkalmazásával neutronforrásból [1] és magreakcióból [2] emittált neutronok intenzitásmérésében értünk el eredményeket.

A neutrontermelő magreakciókban történő felhasználás új követelményeket vet fel az érzékenység és pontosság szempontjából. Neutronforrások kalibrálásánál rendszerint jelentős intenzitású (10^5 — 10^6 n/sec) források nagypontosságú (1%-rendű) mérése a feladat. Magreakciók vizsgálatánál azonban kisebb pontossággal is megelégszünk, de több nagyságrenddel alacsonyabb intenzitások mérése is megoldandó.

A következőkben néhány eredményt mutatunk be, amelyeket a KMnO_4 -oldatos fizikai integrációs módszerrel, illetve annak egyszerű módosításával 10^3 n/sec intenzitástartományban végzett méréssel nyertünk. A leírt módosítás nagymértékben növeli a módszer alkalmazhatóságát magreakció vizsgálatokban.

2. A KMnO_4 módszer módosítása kis intenzitású források mérésére

A moderátor méretének megválasztásánál a detektálható minimális intenzitás, illetve az intenzitásmérés pontossága között kell kompromisszumot találni. A véges moderátorméret miatt szükséges neutronmegszökési korrekció pontatlansága révén behozott hiba a moderátor méretének növelésével rohamosan csökkenthető [1], ugyanakkor azonban a felaktivált oldatminta fajlagos aktivitása a tartálysugár kőbével fordított arányban változik, azaz növekvő moderátor mérettel igen gyorsan csökken.

* Érkezett 1966. aug. 3.

A kompromisszum megkerülésére D. H. *Wilkinson* [3] a következő módszert alkalmazta: igen nagy méretű ($R=60$ cm, össz oldattérfogat 1350 liter) moderátorban helyezi el a mérendő forrást, s a keletkező aktivitást a teljes oldattérfogat átszűrésével, teljes egészében összegyűjti. Ezzel az eljárással 2% pontosság érhető el. Az igen nagy sebességű és jó hatásfokú szűrés megoldásán túlmenően nagy problémát jelent ilyen esetben az oldatnak a szennyeződések hatására végbemenő, szintén MnO_2 képződéssel járó bomlása. Ez ugyanis a szűréssel kapott forrás vastagságát s ezzel önabszorpcióját növeli. Érdeemes megjegyezni, hogy neutronabszorpció 90%-ban az oldattérfogat 10%-át kitevő 28 cm sugáron belül zajlik le, s a maradék 10% aktivitás begyűjtése érdekében 1200 liter oldatot kell leszűrni.

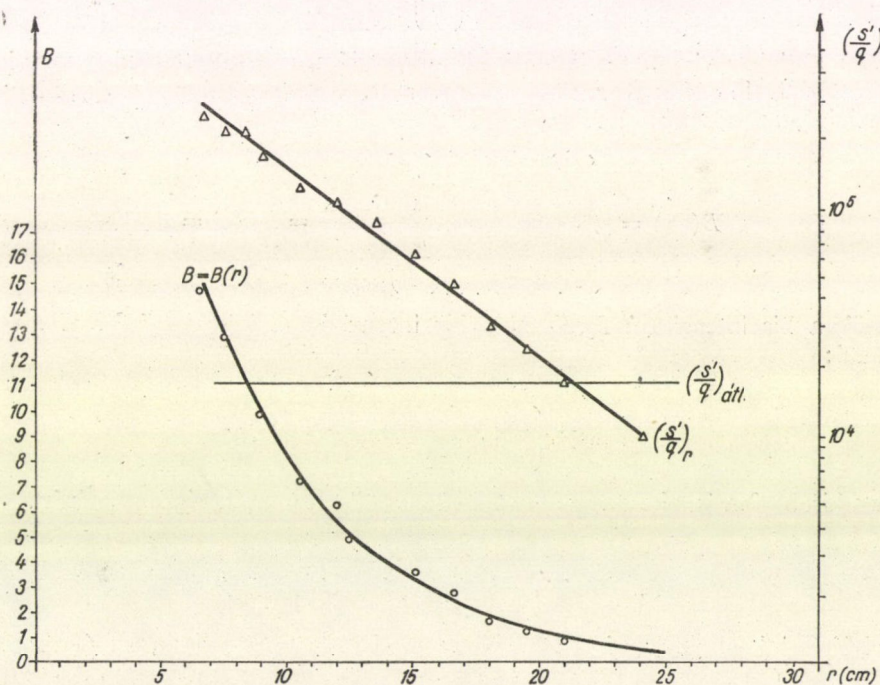
Az általunk kipróbált módszer lényege a következő: a moderátor méretét olyan nagynak választjuk meg, hogy a neutronmegszökési korrekció hibája az előírt mérési pontosságnak még éppen megfelelően (pontosabban: a többi járulékos hibával együtt ne haladja túl a kitűzött korlátot). Nagy intenzitású forrásoknál az oldatban jelentkező aktivitás ilyenkor kényelmesen mérhető, a béta detektor érzékenysége azonban megszabja azt a legkisebb fajlagos oldataktivitást — azaz a legkisebb neutronforrás intenzitást —, amely az adott feltételek mellett még mérhető. Most a mérések érzékenységeinek megfelelő intenzitású forrás alkalmazása mellett a tartály egyik sugara mentén kis térfogatú, a moderátorral azonos koncentrációjú KMnO_4 -oldattal töltött polietilén edényt viszünk végig s pontról pontra megmérjük az edényben felaktivált oldat fajlagos aktivitásának és a moderátor átlagos fajlagos aktivitásának viszonyát. Ekkor azt kapjuk, hogy utóbbi kialakításához a moderátor különböző sugárhoz tartozó térfogatelemei a termikus neutronok eloszlásának megfelelően különböző részintenzitásokkal járulnak hozzá. Minthogy ez az eloszlás adott moderátorközeg és méretek mellett csak a forrás spektrum függvénye, adott típusú, különböző intenzitású forrásoknál egy kiszemelt r helyen szeparált oldatminta fajlagos aktivitása a keverés után kialakuló átlagos értéknek $B(r)$ állandószorosa. Az állandó a forrás közelében, a moderátor térfogatától függően 10—100 közötti értéket vehet fel. Egy ilyen, Po—Be forrásra 62 cm átmérőjű egyenoldalú henger tartályban felvett $B=B(r)$ görbét mutatunk be az 1. ábrán. Mint látható, az $r=r_0$ legkisebb sugáron felvett mérési pontnál az aktiváló edényből nyert minta fajlagos aktivitása az átlagos fajlagos aktivitásnak mintegy 15-szöröse. Ha ez a viszony nagy intenzitású forrásnál végzett mérésekből rendelkezésünkre áll, méréseink alsó intenzitáshatárát hasonló arányban csökkenthetjük; a kis intenzitású forrásnál elegendő csupán az aktiváló edényből vett minta fajlagos aktivitását mérni, ebből az 1. ábra adatai szerint a forrás abszolút intenzitása meghatározható.

A szokásos módszerrel elvégzett méréseknél az abszolút neutronintenzitás kiszámítása a következő formula szerint történik, feltételezve, hogy a Mn^{56} béta sugárzását uránoxid standard preparátummal hitelesített végbalakos Geiger—Müller számlálóval mérjük:

$$Q = \frac{J'_{U_3O_8}}{q} \cdot \frac{a}{p(1-w)} \cdot \frac{V}{v} \cdot \frac{\sigma_{Mn} N_{Mn} + \sigma_H N_H}{\sigma_{Mn} N_{Mn}} \cdot \frac{S \cdot \lambda \cdot F}{[1 - \exp(-\lambda T)][1 - \exp(-\lambda \tau)] \exp(-\lambda t)} \quad (1)$$

ahol $J'_{U_3O_8}$ 1 mg U_3O_8 -ban UX_2 bomlásból eredő részecskeszám másodpercenként ($=10,39 \text{ imp. mg}^{-1} \cdot \text{sec}^{-1}$)

q	a standard preparátum impulzusszáma 1 sec alatt 1 mg-ra vonatkoztatva
a	ablak abszorpciós faktor
p	szűrési határfok
w	neutron megszökési korrekció
v	minta relatív térfogata
$\frac{V}{V}$	
N_{Mn} és N_H	a Mn és H atommagok köbcentiméterenkénti száma
σ_{Mn} és σ_H	a Mn^{55} és H^1 termikus neutronabszorpciós hatáskeresztmetszete
λ	Mn^{56} bomlási állandója
S	T idő alatt detektált beütésszám
τ	aktivációs idő
t	az aktiválás befejezése és a mérés kezdete közötti idő
F	gyors neutron befogási korrekció.



1. ábra. A $B=B(r)$ és az $\frac{S'}{q} = \frac{S'}{q}(r)$ görbe menete 62 cm átmérőjű egyenoldalú hengermoderátor esetén

Bevezetve egy adott méréssorozatra az

$$Y = J \cdot \frac{a}{p(1-w)} \cdot \frac{V}{v} \cdot \frac{\sigma_{Mn} N_{Mn} + \sigma_H N_H}{\sigma_{Mn} N_{Mn}} \cdot \lambda \cdot F = \text{const.} \quad (2)$$

jelölést, továbbá S' -vel jelölve a telítésig aktivált oldatmintának az aktiválás befejezésének időpontjára vonatkozó bomlási sebességét

$$S' = \frac{S}{[1 - \exp(-\lambda T)][1 - \exp(-\lambda \tau)] \exp(-\lambda t)}, \quad (3)$$

az (1) képlet

$$Q = Y \cdot \frac{S'}{q} \quad (4)$$

alakra hozható.

Bevezetjük, az előbb mondottak szerint a

$$B = \frac{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(r=r_0)}}{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(\text{átlag})}} \quad (5)$$

fajlagos aktivitás viszonyt adott mérési geometriára, azaz adott moderátorméretre az adott aktiváló edény $r = r_0$ elhelyezése mellett. Mivel két különböző Q_1 , illetve Q_2 intenzitású, azonos típusú forrásra

$$B(Q_1) = \frac{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(r_0, Q_1)}}{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(\text{átl.}, Q_1)}} = \frac{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(r_0, Q_2)}}{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(\text{átl.}, Q_2)}} = B(Q_2) = B \quad (6)$$

teijesül, a kis intenzitású forrás abszolút intenzitása a következő formában számítható:

$$Q_2 = Y \cdot \frac{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(\text{átl.}, Q_2)}}{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(r_0, Q_2)}} = \frac{\left(\frac{S'}{q}\right)_{(r_0, Q_2)}}{B} \cdot Y \quad (7)$$

azaz a kisebb forrásnál csak az aktiváló edényből vett mintán végzünk mérést.

3. Mérési eredmények, következtetések

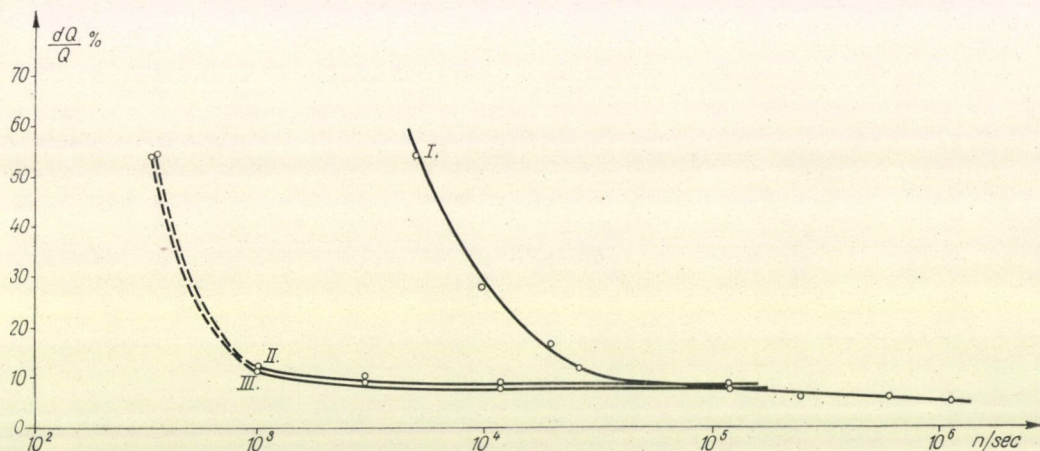
Méréseinknél az [1] és [2]-ben leírt moderátort használtuk, az (1) formula egyes adatainak meghatározásánál az ott részletezett módon jártunk el. Az aktiváló edény 500 cm³ térfogatú polietilén palack volt, polietilén csövön felfüggesztve. A csövön keresztül az oldat a palack kiemelése nélkül be- és kitölthető. A forrást az edénnyel $r_0 = 6,7$ cm tengelytávolságig tudtuk megközelíteni.

Az 1. táblázatban a KMnO_4 oldatos fizikai integrációs módszer eredeti és általunk módosított formájában végzett mérések eredményeit gyűjtöttük össze. A mért források intenzitása 10^6 – 10^3 n/sec nagyságrendben változik. A kétféle mérési módszerrel nyert eredmények egymással, valamint a Po^{210} bomlása alapján a gyárilag megadott kezdeti intenzitásból számított értékekkel jól egyeznek. A 2. ábrán a két módszer alapján végzett forrásintenzitásmérések hibáját tüntettük fel

1. TÁBLÁZAT

A forrás gyárilag megadott kezdeti intenzitása		Intenzitásmérés időpontja	Po ²¹⁰ bomlása alapján számított intenzitás Q ; n/sec	Mért forrásintenzitás Q : n/sec	
időpont	Q_0 ; n/sec			régi módszer	új módszer
1959. IV. 24.	$19,5 \cdot 10^6 \pm 10\%$	1960. XI. 2.	$1,19 \cdot 10^6 \pm 10\%$	$1,13 \cdot 10^6 \pm 5\%$	—
1962. IX. 1.	$11,8 \cdot 10^6 \pm 10\%$	1965. XII. 7.	$3,09 \cdot 10^4 \pm 10\%$	$2,63 \cdot 10^4 \pm 12\%$	—
1962. V. 1.	$19,3 \cdot 10^6 \pm 10\%$	1966. I. 3.	$1,99 \cdot 10^4 \pm 10\%$	$1,95 \cdot 10^4 \pm 16\%$	$1,92 \cdot 10^4 \pm 8\%$
1960. VII. 8.	$22,6 \cdot 10^6 \pm 10\%$	1966. II. 4.	$0,88 \cdot 10^3 \pm 10\%$	—	$1,01 \cdot 10^3 \pm 11\%$

az általunk használt elrendezésre vonatkozóan. Az I. görbe a régi módszerre vonatkozik, míg a II. és III. az újhoz tartozó hibaértékeket tünteti fel. Utóbbiak abban térnek el egymástól, hogy a $B(r=r_0)$ konstans meghatározását II.-nél $2,45 \cdot 10^5$ n/sec, III.-nál $6 \cdot 10^6$ n/sec intenzitású forrás alkalmazásával végeztük el. A szaggatott vonallal jelzett görbe szakaszokat $5 \cdot 10^2$ n/sec-ig számításokkal extrapoláltuk.



2. ábra. A régi (I. görbe) és az új (II. és III. görbe) módszerrel végzett neutronintenzitásmérések hibája. A $B=B(r=r_0)$ konstans meghatározás II.-nél illetve III.-nál $2,45 \cdot 10^5$ n/sec, illetve $6 \cdot 10^6$ n/sec intenzitású forrás alkalmazásával történt

A görbék összevetéséből közvetlenül látható, hogy

a) az új módszer előnyösen alkalmazható néhányszor 10^4 n/sec forrás intenzitás alatt s adott pontosságú mérést a régi módszerhez képest kb. $1/B(r=r_0)$ -szeres forrásintenzitásig tesz lehetővé.

b) a $B=B(r)$ függvény felvételénél nincs szükség az említett felső határnál lényegesen magasabb intenzitású neutronforrásra.

Megjegyezzük, hogy a közölt adatok az általunk használt mérési feltételek között érvényesek, így pl. nagyobb moderátorméret esetén a $B(r=r_0)$ érték lényegesen nagyobb, az érzékenység relatíve nagyobb mértékben növekszik. Az abszolút intenzitásmérés alsó határa azonban lényegesen nem csökkenthető.

Módszerünkkel elért intenzitás alsó határ egy nagyságrenddel alacsonyabb *Kh. Fährmann* [4] által MnSO_4 moderátorra adott értéknél.

IRODALOM

- [1] *Koltay E.*, Magyar Fizikai Folyóirat, 9, 89, 1961.
- [2] *E. Koltay*, Acta Phys. Hung., 16, 93, 1963.
- [3] *D. H. Wilkinson*, A. E. R. E. NP/R 1577, 1957, 39 old.
- [4] *Kh. Fährmann*, Reprint Zfk-RN 33. 1966.

HÉLIUM KRIOSZTÁT 2 K°-TÓL 300 K°-IG TERJEDŐ HŐMÉRSÉKLETEK ELŐÁLLÍTÁSÁRA*

BALLA JÁNOS

KFKI Szilárdtestfizikai Laboratórium

Szilárdtestfizikai kutatásokkal foglalkozó laboratóriumokban gyakori feladat fémek és ötvözetek vezetési tulajdonságainak — mint hővezetési tényező, elektromos ellenállás, mágneses ellenállásváltozás, fajhő stb. —, vizsgálata a hőmérséklet függvényében. Fontos elvi és egyre jobban növekvő gyakorlati (pl. szupravezetés, úrkutatás, maradékellenállás meghatározása) jelentősége van az abszolút nulla fokhoz közeli hőmérsékletekre, illetve pl. fázisátalakulások vizsgálatánál az alacsony hőmérsékletek széles tartományára kiterjedő vizsgálatoknak.

E mérési feladatok megvalósításához folyékony hélium és folyékony nitrogén hűtőközegek, speciális hőmérsékletszabályozók és különleges mérőberendezés, ún. *kriosztát* szükségesek.

A kriosztát szerkezete és működése

A vezetési jelenségek vizsgálatára szolgáló hélium kriosztát tervezésénél és építésénél az alábbi főbb szempontokat vettük figyelembe:

a) 2 °K-tól 300 °K-ig tetszőleges hőmérséklet előállítása és $\pm 0,1$ °K pontossággal történő szabályozása;

b) minimálisan 48 órás mérési idő 4,21 °K-on a folyékony hélium utántöltése nélkül;

c) gyorsan és egyszerűen megvalósítható mintacsere a kriosztát működési hőmérsékletén;

d) a párolgási veszteségek alacsony szinten tartása (megengedett maximális párolgási veszteség 0,1 liter folyékony hélium óránként);

e) sokoldalú használhatóság, beleértve a 45 mm-nél nagyobb pólustávolságú mágnesnél, ill. légrés-átmérőjű szolenoidnál való alkalmazást;

f) a szerkezet és a működtetés egyszerűsége;

g) a meghibásodások könnyű elhárítási lehetősége.

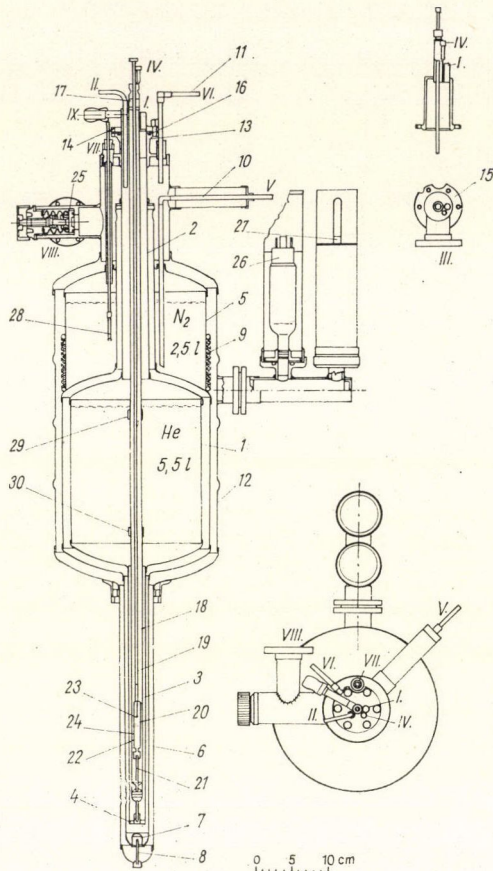
A kriosztát léptékhelyes vázlatát az 1. ábra szemlélteti. A kívánt mérési időt az 5,5 l űrtartalmú folyékony hélium tartály, a párolgási veszteségek alacsony szinten tartását a hővezetés és hősugárzás elleni védelem, a szolenoidban vagy mágnespólusok közötti elhelyezést a 45 mm külső átmérőjű alsó nyúlvány biztosítja.

A bemutatott elrendezésben a folyékony héliumba merülő kísérleti kamrával (18) szerelt kriosztát mágneses fázisváltások vizsgálatára szolgál 2—3 mm átmérőjű

* Érkezett 1966. okt. 11.

hengeres próbatesteken a hélium hőmérséklettől 65 °K-ig terjedő intervallumban.

A kriosztát belső terét foglalja el az 1 mm vastag újezüst lemezből keményforrasztással összeállított, külső felületén tükörfényesre polírozott folyékony hélium tartály (1), amelynek alsó nyúlványát $\varnothing 22 \times 0,5$ mm méretű rozsdamentes acél cső



1. ábra. A HÜ-104-es típusú hélium kriosztát szerkezeti vázlata. 1 — folyékony hélium tartály, 2 — rozsdamentes acél nyakcső $\varnothing 33,6 \times 0,3$ mm; 3 — alsó nyúlvány cső; 4 — központosító fenék; 5 — folyékony nitrogén tartály; 6 — 77,4 °K hőmérsékletű árnyékoló burka; 7 — teflon betét; 8 — központosító cső; 9 — aktív szén; 10 — folyékony nitrogén töltő-cső; 11 — nitrogén párologtató cső; 12 — külső vákuumköpeny; 13 — szerelőkarima; 14 — fedél; 15 — vákuumozó csomagtartó; 16 — teflon tömítés; 17 — mintatartó tömítés; 18 — kísérleti kamra; 19 — mintatartó cső, $\varnothing 4 \times 0,2$ mm; 20 — réz mintatartó; 21 — központosító cső; 22 — fűtőtekercs; 23 — termopár; 24 — ellenállás-hőmérő; 25 — vákuumszelep; 26 — termokeresztes vákuummérő-cső, 27 — ionizációs vákuummérő-cső; 28 — folyékony nitrogén szintjelző; 29 — folyékony hélium felső szintjelző tekercs; 30 — folyékony hélium alsó szintjelző tekercs.

I — folyékony hélium betöltés; **II** — hélium párologás; **III** — folyékony hélium vákuumozásához szivattyú csatlakozás; **IV** — folyékony hélium szintjelzők kivezetése; **V** — folyékony nitrogén betöltés; **VI** — folyékony nitrogén párologás; **VII** — folyékony nitrogén szintjelző kivezetése; **VIII** — vákuumrendszer csatlakozás a vákuumköpeny evakuálására; **IX** — vákuumrendszer csatlakozás a kísérleti kamra evakuálására

(3) képezi. A nyúlvány cső (3) központosító végződése (4) állítja a kriosztát középvonalába a kísérleti kamrát (18) és az anyagmintát. A 4,21 °K vagy annál kisebb hőmérsékletű folyadéktartály (1) $\varnothing 33,6 \times 0,3$ mm-es rozsdamentes acél nyakcsővön (2) keresztül van összekötve a szobahőmérsékletű környezettel. A nyakcső adott átmérője a hélium tartály bevezetéseihez szükséges minimális körkeresztmetszetet, a 0,3 mm-es falvastagság pedig a vákuumköpeny gáztömör elválasztását biztosítja, és mint elkerülhetetlen hőhid éppen kis méreteinél és anyagminőségénél fogva nagy hővezetési ellenállást képvisel. A hővezetési ellenállás növelése céljából az 1 mm vastag rézlemezről keményforrasztással készített 2,5 liter űrtartalmú, nikkelezett és tükrőfényesre polírozott felületű folyékony nitrogén tartály (5) belső csőköpenye a folyékony hélium-tartályból 230 mm távolságra csatlakozik a nyakcsőhöz (3), s ez a forrasztott csatlakozási hely 55 mm távolságban van a kriosztát felső szobahőmérsékletű peremétől (13).

A folyékony nitrogén 77,4 °K-os hőmérsékletét hővezetéssel veszi fel a réz árnyékoló köpeny (6), amelynek alsó végén levő teflon betét (7) a polírozott felületű újezüst lemezből (lemezvastagság 1,25 mm) keményforrasztással összeerősített külső vákuumköpeny (12) $\varnothing 45 \times 1$ mm méretű sárgaréz csőnyúlványába erősített $\varnothing 3 \times 0,5$ mm-es rozsdamentes acél központosító csövet (8) választja el a hideg felülettől. A külső vákuumköpeny (12) 1 at külső nyomásra van igénybevéve, a lemezpalást szilárdságát peremezéssel növeltük meg.

Az árnyékoló bura egymással jó hőkontaktusban levő részei összeforrasztás után tükrőfényesre lettek polírozva, majd felületüket a hősugárzás elleni védelem céljából galvanikus úton néhány mikron vastagságú ezüstreteggel bevontuk és tükrösítettük. Megjegyzendő, hogy a bura aranyozásával a sugárzás elleni védelem további javítását lehetne elérni. Az árnyékoló bura a hélium-tartályt körülvevő vákuumteret két részre osztja, a tér belső része a külsővel a cseppfolyós nitrogén tartály feletti köralakú áttöréseken van összekötve.

A különböző hőmérsékletű hengerpalástok közötti távolságok állandó értéke a hőveszteségek alacsony szinten való tartásán kívül a kriosztátban végzett mérés pontosságának is feltétele lehet. Ezért az egymásba illeszkedő hengerpalástok elkészítésénél és szerelésénél az egytengelyűséget feltétlenül biztosítani kell. Ha hideg állapotban a hélium-tartály alsó csőnyúlványa (3) a kriosztát középvonalából kimozdulna, elmozgását megfelelő helyen alkalmazott kis-keresztmetszetű rozsdamentes acél távköztartóval kell megakadályozni.

A folyékony nitrogén tartály (5) alsó részén övszerűen helyezkedik el a kb. 240 cm³ térfogatú aktív szén (Nuxid BO) adszorber, amely vákuumozás után még a vákuumköpenyben maradt gázmolekulák adszorpciós megkötésével járul hozzá a vákuum további javításához. A behelyezett aktív szén adszorpciós kapacitása a folyékony nitrogén hőmérsékletén $1 \cdot 10^{-3}$ torr-nál kisebb nyomáson kb. 100 N cm³ levegő.

A folyékony nitrogént a vákuumköpenyen áthaladó $\varnothing 6 \times 0,5$ mm-es újezüst csővön (10) vezetjük be a nitrogén tartály alsó szintjére. A keletkezett nitrogén gőz a folyadék feletti térből az $\varnothing 8 \times 0,5$ mm-es újezüst csővön távozik.

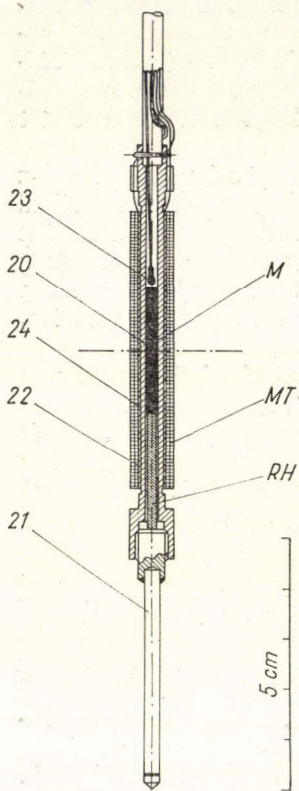
A hélium-tartályba merülő csöveket illetve azok vezető és tömítő perselyeit keményforrasztással rögzítettük a rozsdamentes acél fedélbe (14). A 4,21 °K-nál kisebb hőmérsékletek előállítására szükséges redukált nyomást a vákuumozó csonkon (15) lehet előállítani. A fedél (14) és a vákuumozó csonk (15) tömítésére az alacsony hőmérsékleteken is használható teflon gyűrű (16) szolgál.

Az $\varnothing 4 \times 0,2$ mm méretű rozsdamentes acél mintatartó cső (19) felső meleg vége a kísérleti kamrába (18) történő bevezetésnél gumigyűrűvel (17) van tömítve. A cső (19) alsó végéhez csatlakozik az elektrolitikus rézből készített mintatartó (20), amelynek középvonalba állítását az $\varnothing 2 \times 0,2$ mm-es rozsdamentes acél központosító cső (21) végzi. A hengeres alakú mintát a mintatartó középpontos furatába helyezzük, és a furatot a mintával azonos átmérőjű réz hengerrel lezárva a tengelyirányú elmozdulással szemben a központosító cső (21) menetes nyúlványával rögzítettük.

A mintatartó (20) külső felületére több-bekezdésű menetet vágunk. Az egyik menetben a szigetelt manganin huzalból bifilárisan tekercselt 100 ohmos fűtőtekercset (22), a másikban a szobahőmérsékleten 100 ohm ellenállású, bifiláris tekercselésű szigetelt platina ellenálláshőmérőt (24) helyeztük el. A mintatartó külső méreteit úgy adtuk meg, hogy az előbbiektől és a mintatartótól elektromosan elszigetelve a mérőtekercs is felvihető legyen. A platina ellenálláshőmérő (24) mellett Au + 0,03 atom % Fe-kromel termopárt (23) is beépítettünk a 36 °K alatti hőmérsékletek mérésére. A mintatartó vázlatát lásd a 2. ábrán.

Az $\varnothing 15 \times 0,5$ mm méretű rozsdamentes acél csőből készített kísérleti kamra (18) felső meleg végén a IX jelű csatlakozáson keresztül történik a kamra kívánt nyomásának előállítása: atmoszferikus vagy redukált nyomású hélium gáz töltet, ill. nagyvákuum. A fűtő- és mérőtekercs, továbbá a hőmérők egymástól elszigetelt kivezetései a mintatartó cső (19) belső furatában haladnak, és a cső felső meleg végén araldit ragasztással vannak tömítve.

A leírt mintaelrendezés mellett a mintacsere hideg állapotban is könnyen és gyorsan elvégezhető. Kicsavarjuk a gumigyűrű (17) feletti tömítőcsavart és a mintatartót a benne elhelyezett próbatesttel együtt kiemeljük, majd a tömítőcsavar helyébe azonnal behajtott menetes dugóval hermetikusan zárjuk a kísérleti kamrát (18). A kiemelt részeket meleg levegővel szobahőmérsékletre hozzuk és megszáritjuk. A központosító cső (21) lecsavarásával a minta alatti réz henger (RH) és a minta csipesszel eltávolítható. Az új próbatest elhelyezése után visszahelyezzük a réz hengert (RH), becsavarjuk a központosító csövet (21), nyitjuk a kísérleti kamrát és annak felső nyílásába gyorsan bevezetjük a mintatartót (20). A párolgási veszteség mérséklése érdekében a szobahőmérsékletű fém rendszert néhány percre a folyékony hélium szintje felett tartjuk előhűtés céljából. Ezután a mintatartó csövet (19) végső helyzetébe hozzuk — középvonalba állítását a központosító cső (21) végzi el —, majd a tömítőcsavar meghúzásával helyreállítjuk az eredeti állapotot. A mintatartó kivétele és visszahelyezése közben a kísérleti kamra lelevegőzésének megakadályozására a IX jelű



2. ábra. A mágneses fázisváltások vizsgálatára alkalmas mintatartó vázlata.

- M — minta;
 MT — mérőtekercs;
 RH — rézhenger;
 20 — mintatartó;
 21 — központosító cső;
 22 — fűtőtekercs;
 23 — termopár;
 24 — platina ellenálláshőmérő

csatlakozással összekötött gumiballonból folyamatosan néhány torr túlnyomású hélium gázt nyomunk a kísérleti kamrába (18). A mintacsere szokásos időtartama 4–5 perc.

A folyékony hélium betöltésére szolgáló vákuumköpenyű töltőcső az I jelű nyíláson dugható be a kriosztátba. Tömítésére paragumi tömlőből levágott 20–30 mm hosszú csődarabot használunk. Az elpárolgott hélium gázt a II. jelű csőcsomponkon vezetjük ki a héliumtartályból, és paragumi tömlőn juttatjuk el a gyűjtővezetékhez vagy a gumiballonhoz.

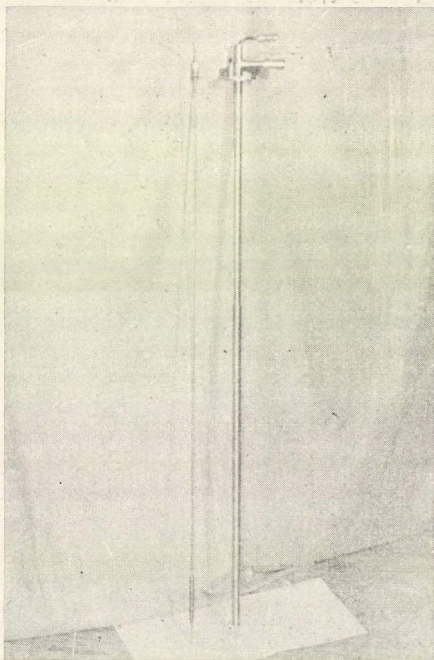
A vákuumköpeny evakuálását a 20 mm átmérőjű csőmembrános vákuumszelepen (25) keresztül lehet elvégezni. A szelepet elzárva a hideg kriosztát statikus vákuumköpenyében a nagyvákuum hosszú időn keresztül fenntartható. A köpenyben uralkodó nyomást a közös csatlakozó csomokra szerelt termokeresztes-vákuummérőcső (26) és az ionizációs-vákuummérőcső (27) detektálja.

A kriosztát működése szempontjából fontos folyadékszintek pillanatnyi értékének jelzésére, ill. állandó értéken tartására szolgálnak a nitrogén szintmutatója (28) és a hélium felső és alsó szintjelzője (29, ill. 30). Ezek, továbbá a hőmérők bővebb ismertetését lásd a segédberendezéseknél.

A kriosztát a 2°K-tól 300°K-ig terjedő hőmérséklet-tartományban a következő módon működtethető:

a) 4,21°K-nál kisebb hőmérsékletek előállítására a héliumfürdő feletti nyomást kell csökkenteni. A folyadék felveszi a beállított nyomáshoz tartozó egyensúlyi hőmérsékletet, ill. az elérendő hőmérsékletnek megfelelő nyomást a kriosztát segédberendezését képező szívásszabályozóval lehet előállítani. 2°K-ot 20 m³/h szívóteljesítményű, ennél kisebb hőmérsékletet 30 m³/h szívóteljesítményű két-fokozatú — szívó és nyomóoldalán egyaránt héliumtömör — elővákuumszivattyúval tudtunk elérni. E hőmérséklet-tartományban a minta közvetlenül a folyadékfürdőben, vagy az elérendő legkisebb hőmérséklethez tartozó egyensúlyi nyomásnál valamivel kisebb redukált nyomású hélium gázzal töltött kísérleti kamrában (18) lehet.

b) 4,21°K-tól 65°K-ig a mintát a héliumfürdővel körülvett, atmoszferikusnál valamivel kisebb nyomású hélium gázzal töltött csőbe helyezve megvárjuk, amíg felveszi a folyékony hélium hőmérsékletét v. ahhoz közel álló hőmérsékletet. A kísérleti kamra a benne elhelyezhető mintatartóval a 3. ábrán látható. Ezután a kísérleti kamrát $1 \cdot 10^{-5}$ -nél kisebb nyomásig vákuumozzuk és a mintatartóra felvitt fűtőtekercset az elektronikus hőmérsékletszabályozóval a hálózatra kapcsoljuk. A beállított hőmérsékletnek meg-



3. ábra. A kísérleti kamra és az abban elhelyezhető mintatartó

felelő fűtőáram szabályozását a hőmérsékletszabályozó a továbbiakban automatikusan végzi el. Mivel ebben az esetben a minta és a $4,21^\circ\text{K}$ -os környezet közötti hőátvitel egyetlen lehetséges módja a sugárzás, kis fűtőtéljesítménnyel nagy hőmérsékletemelkedés biztosítható, és a párolgási veszteség sem nő jelentékeny mértékben.

c) 65°K -tól a folyékony nitrogén normál forráspontjáig ($77,4^\circ\text{K}$ -ig) az a) szerinti mintaelrendezés mellett folyékony hélium helyett cseppfolyós nitrogént alkalmazva és a kísérleti kamrát atmoszferikus nyomású hélium gázzal feltöltve, juthatunk el. A redukált nyomások beállítására az a) esetben is használt szívás-szabályozót és vákuumszivattyút használjuk.

d) $77,4^\circ\text{K}$ -tól 300°K -ig a b)-nél ismertetett módszert alkalmazzuk, természetesen itt is folyékony nitrogénnel töltjük meg a héliumtartályt.

Megjegyzendő, hogy a 2°K -tól 300°K -ig terjedő teljes hőmérséklettartomány előállítható folyékony héliummal az a) és b) eljárás szerint, de nagyobb mintahőmérsékletnél már jelentékeny lesz a sugárzásos hőátvitel következtében elpárolgó cseppfolyós hélium mennyisége.

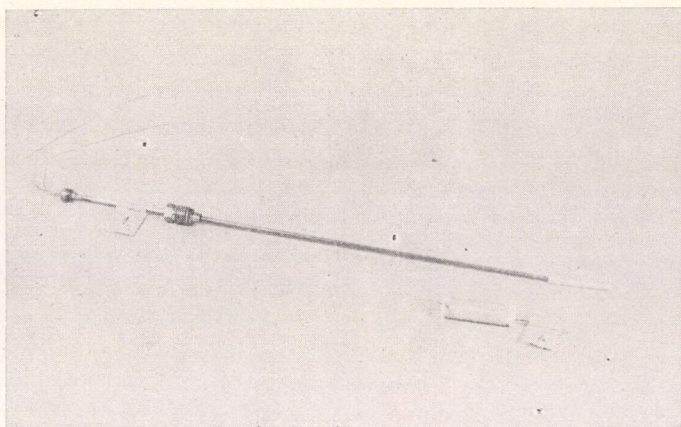
Segédberendezések

A kriosztát használata közben az alábbiakban ismertetésekre kerülő segédberendezések az egyes műveletek végrehajtását és a főbb jellemzők ellenőrzését, ill. szabályozását biztosítják.

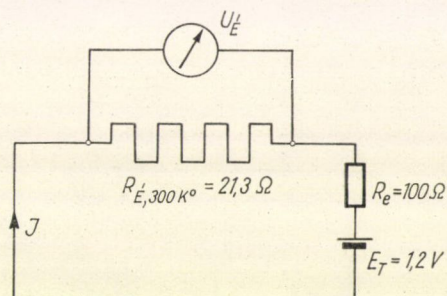
1. Szintjelzők

A folyékony nitrogén szintjének jelzésére $0,1\text{ mm}$ átmérőjű nikkelhuzal ellenállásváltozását használjuk: elektromos ellenállása szobahőmérsékleten 7 ohm , a folyékony nitrogén hőmérsékletén pedig $0,7\text{ ohm}$. A tekercs áramkörébe 10 V -os egyenfeszültségű telepet és egy 10 ohm os állandó értékű ellenállást kapcsolva az áthaladó áram hatására a folyadék felszíne felett néhány milliméterre levő tekercs ellenállása a folyadék és gőz hővezetése közötti különbség következtében 1 ohm -ra nő. Ennek megfelelően a szintjelző kapcsain mérhető feszültség folyékony nitrogénbe merült tekercsnél $0,655\text{ V}$, a folyadékkal azonos hőmérsékletű gőzben levőknél $0,935\text{ V}$. A nikkel-tekercs az automatikus folyékony nitrogén utántöltő érzékelőjeként használható, ha a beavatkozó szerv (pl. a folyékony nitrogén szállítóedénybe helyezett 30 W teljesítményű párologtató tekercs) áramkörébe megfelelő adatokkal rendelkező diódát (teljesítmény csúcs 10 A , 400 V ; nyitófeszültség $0,8\text{ V}$, $50\text{--}100\text{ mA}$) kapcsolunk. Egyszerű szintjelzőként történő alkalmazásnál a beavatkozó szerv helyett pl. 24 V -os jelzőlámpa van az áramkörben. A szintjelzőt és a párologtató tekercset lásd a 4. ábrán.

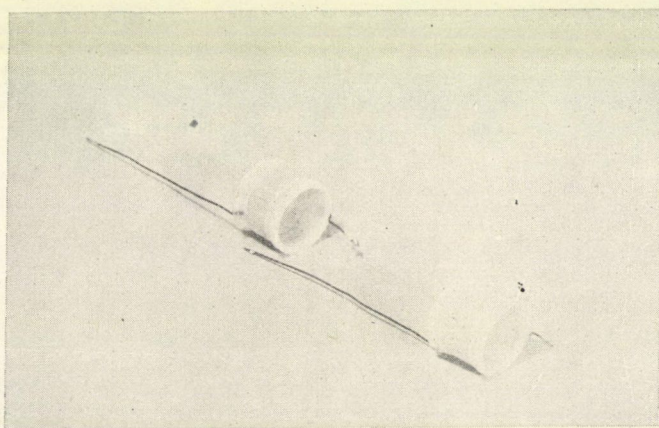
A folyékony hélium tartályban a megengedett — nyugodt, és csak kis mértékben párolgó — felső, ill. alsó folyadékszintet a két nióbbium tekercs kapcsán mérhető feszültség eltűnése jelzi. A huzal átmérője $0,1\text{ mm}$, a nióbbium ún. ugrási hőmérséklete $T_k = 8,7\text{--}8,9^\circ\text{K}$. A szintmutató igen egyszerű kapcsolását az 5. ábrán, a teflon tekercstartóra feltekercselt hélium szintindikátorokat a 6. ábrán mutatjuk be. Ismerve a nióbbium ellenállásváltozását a hőmérséklet függvényében, a mért feszültség alapján a kriosztát előhűtésének menetét is ellenőrizni tudjuk: pl. az ábrán



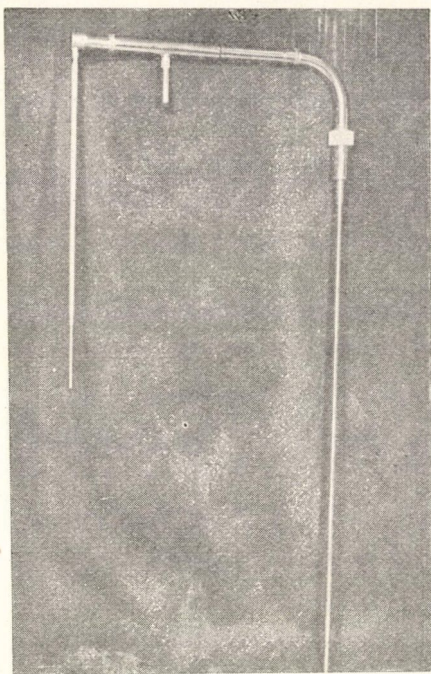
4. ábra. Folyékony nitrogén szintjelző (1) és párologtató (4) tekercs



5. ábra. A folyékony hélium szintjelző kapcsolási vázlata



6. ábra. A folyékony hélium szintjelző niobium tekercsei



7. ábra. Folyékony hélium töltőcső.

vázolt kapcsolásnál $U_{E\ 300^\circ K} = 0,213\text{ V}$; $U_{E\ 77,4^\circ K} = 0,147\text{ V}$ és $U_{E\ 4,21^\circ K} = 0\text{ V}$. A szintmutatók kivezetéseit a IV jelű helyen araldittal tömítettük.

2. Töltőcsövek

A cseppfolyós nitrogént szigetelés nélküli paragumi tömlőn kb. 0,1 att. túlnyomással nyomjuk a szabványos szállítóedényből a kriosztát nitrogéntartályába.

A folyékony héliumot vákuumköpenyű csövön keresztül néhány torr túlnyomással töltjük át a 10 l űrtartalmú szállítóedényből a kriosztát héliumtartályába. A belső folyadékvezeték $\varnothing 4 \times 0,2\text{ mm}$ méretű rozsdamentes acél cső, a külső cső sárgarézh. A két cső közötti teret meleg állapotban $1 \cdot 10^{-5}$ torr nyomásig vákuumoztuk és hermetikusan zártuk. A zárási műveletet vákuumozás közben végeztük el: lágy rézcső ($\varnothing 6 \times 1\text{ mm}$) szívócsonknál hidegfolyatással és lecsípéssel, kovár-üveg szívócsonknál az üveg összeolvasztásával. A belső csővel jó hőkontaktusban levő aktív szén adszorber (5–10 gr) a folyékony hélium hőmérsékletére hűlve a vákuumot

tovább javítja. A 7. ábrán látható töltőcsővel a szállítóedényben gumiballonnal létrehozható nyomásviszonyok mellett percenként 0,5–0,8 liter folyékony héliumot tudunk kb. 20%-os veszteséggel áttölteni. A folyadékvezetékbe épített csőmembrános tűszelep a folyadékcső töltés előtti légtelenítését és a folyadékáram biztos zárását teszi lehetővé.

3. Hőmérők

a) $300^\circ K$ -tól $30^\circ K$ -ig a mintatartóra tekercselt — szobahőmérsékleten 100 ohm ellenállású — platina ellenálláshőmérőt használjuk. Bár a tiszta platina fajlagos ellenállásának hőmérsékletfüggése jól ismert és $90,2^\circ K$ -ig (a folyékony oxigén forráspontja) az általános érvényű ellenállás-hőmérséklet interpolációs egyenlet, továbbá a normál-atmoszferikus nyomástól eltérő légnyomásoknál alkalmazandó korrekciós egyenlet is rendelkezésre áll, az ennél kisebb hőmérsékletekre való tekintettel a hőmérőt a szekunder hőmérsékleti fix-pontok, továbbá hidrogén gőznyomás-hőmérő segítségével kalibrálni kell. A jelzett hőmérséklettartományban a platina ellenálláshőmérő az elektronikus hőmérsékletszabályozó érzékelőjét képezi. A platinaellenállás viszonylag kis hőmérsékletegyütthatója miatt különös gondot ügyeltünk a vezeték és kontaktusellenállásokra, továbbá a platinaellenállás és a réz hozzávezetés csatlakozásainál fellépő termoelektromos feszültség kiküszöbölésére.

b) $36^\circ K$ és $1,5^\circ K$ között az utóbbi években elterjedt $\text{Au} + 0,03\text{ atom \% Fe}$

kromel termopárt alkalmazzuk, amelynek érzékenysége jóval meghaladja az eddig ismert termopárokat. Referencia hőmérséklet 4,21 °K, pontosság 1%. Tájékoztatásul néhány pontra vonatkozóan az I. táblázatban megadjuk az azonos anyagból készült toldásmentes hozzávezetéseknek érvényes kalibrációt [1].

I. TÁBLÁZAT

A speciális tisztaságú Au + 0,03 atom % Fe-kromel termopár kalibrációja 1,5—36 °K-ig 4,21 °K-os referencia hőmérsékletnél

Hőmérséklet T(°K)	Érzékenység S(T) ($\mu\text{V}/^\circ\text{K}$)	Átlagos érzékenység, f(T) ($\mu\text{V}/^\circ\text{K}$)	Termofeszültség E(T) (μV)
1,5	10,54	12,43	— 33,70
2	11,51	12,74	— 28,17
2,5	12,16	13,00	— 22,24
3	12,71	13,23	— 16,02
3,5	13,15	13,43	— 9,55
4	13,55	13,63	— 2,88
5	14,19	13,95	11,01
6	14,62	14,21	25,42
7	15,04	14,44	40,27
8	15,33	14,63	55,43
9	15,49	14,80	70,88
10	15,65	14,92	86,37
12	15,83	15,13	117,9
14	15,74	15,28	149,6
16	15,59	15,34	180,9
18	15,36	15,36	211,8
20	15,14	15,35	242,4
23	14,43	15,24	286,4
26	14,10	15,11	329,2
30	13,54	14,92	384,5
33	13,29	14,76	444,9
36	13,06	14,60	464,1

4. Hőmérséklet szabályozók

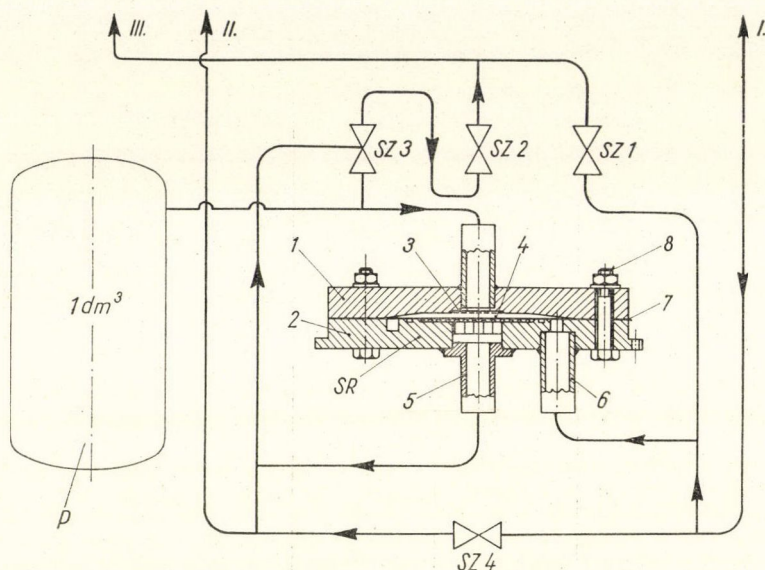
a) Szívásszabályozó

A folyékony hélium és a folyékony nitrogén normál forráspontja alatti hőmérsékleteket — mint már említettük — a fürdő vákuumozásával lehet előállítani. A kívánt hőmérsékletre tartozó gőznyomásgörbe szerinti egyensúlyi nyomás beállítása és stabilizálása a vákuumszivattyú szívócsővébe iktatott síkmembrános szívásszabályozón történik. Szabályozási tartomány abszolút nyomás értékben 760—10 torr, tehát a folyékony héliummal megvalósítható hőmérséklettartomány 4,211 °K-tól, 1,738 °K-ig terjed. A szabályozás pontossága e hőmérsékletközben jobb mint $\pm 0,01$ °K. A folyékony nitrogénnel elérhető hőmérsékleteknél a szabályozás pontossága 760—600 torr között $\pm 0,1$ °K, 600 torr alatt jobb mint $\pm 0,01$ °K. A 8. ábrán bemutatott kapcsolási vázlat szerinti HŰ—106-os típusú szívásszabályozó működése a következő:

a síkmembrános szabályozót (SR), a puffertartályt (P) és a csővezeték a kriosztát munkaterével együtt légtelenítjük a vákuumszivattyú segítségével;

a kriosztát héliumtartályát és a szívásszabályozót az SZ1 szelepen keresztül összeköttetésbe hozzuk a hélium gyűjtővezetékkel, és feltöltjük hélium gázzal;

a kriosztát folyékony hélium feltöltése alatt a párologtatás a szívásszabályozón keresztül történik, ehhez az SZ1 szelepet nyitni, az SZ2, SZ3 és SZ4 szelepeket pedig zárni kell;



8. ábra. A szívásszabályozó kapcsolási vázlatja.

SR — síkmembrános szabályozó; P — puffertartály, $V=1 \text{ dm}^3$; I — felső fedél; 2 — alsó fedél; 3, 4 — sárgaréz szitaszövet, lyukméret 0,1 mm; 5, 6 — csőcsatlakozók; 7 — műselyemmel erősített műanyag síkmembrán; 8 — szorítócsavarok, M 5; I — csatlakozás a kriosztáthoz; II — csatlakozás a szivattyúhoz; III — csatlakozás a hélium gyűjtőhöz

a folyadékfürdő vákuumozása kezdetén SZ1, SZ2 és SZ3 szelepek zárva vannak, a vákuumozást az SZ4 szelepen keresztül végezzük az elérendő hőmérsékletnek megfelelő egyensúlyi nyomásig;

e nyomást az SZ3 szelep nyitásával a puffertartályba és a membrán (7) feletti térbe vezetjük, zárjuk az SZ3 majd az SZ4 szelepet;

a vákuumozás ezeknél a szelepállásoknál a síkmembrános szabályozón (SR) keresztül folytatódik és a beállított nyomás fenntartása az alábbiak szerint valósul meg: ha megnő a nyomás a kriosztátban, a membrán kissé kitér a szívókamra felső része felé és ezzel nő a szívási keresztmetszet; ellenkező esetben a membrán fölötti nyomás a nagyobb értékű, és a síkmembránt a szívókamra alsó felületéhez szorítva csökkenti az áramlási keresztmetszetet.

A szívásszabályozót sárgarézből készítettük, a membránnal érintkező felületeket gondosan megmunkáltuk. A membrán anyaga az ipar által előállított pneumatikus szabályozókban található membránokéval azonos.

b) Elektronikus hőmérsékletszabályozó

A folyékony hélium és a folyékony nitrogén normál forráspontja feletti hőmérsékletek előállításánál a fűtőáram szabályozására a laboratóriumunkban kidolgozott hőmérsékletszabályozót (NV—218 típusú egyenfeszültségű erősítő és NV—220 típusú végfokozat) alkalmazzuk [2].

Az egyenfeszültségű erősítő nagy érzékenysége lehetővé teszi, hogy az ismertetett termopár használatánál 1,5—36 °K hőmérsékletek között az elérhető pontosság jobb mint $\pm 0,006$ °K.

Szobahőmérsékleten 100 ohm ellenállású platina hőmérővel a 30 °K-tól 300 °K-ig terjedő intervallumban $1\mu\text{W}$ hőmérő disszipációnál a pontosság az előbbivel azonos.

A hőmérsékletszabályozóhoz csatlakoztatható NV—213 programvezérlő lehetőséget ad a hőmérséklet beállított emelkedési vagy süllyedési idővel történő lineáris változtatására.

5. Félautomatikus működésű vákuumrendszer

A kriosztát vákuumköpenyének légtelenítésére a HÜ—127 típusú félautomatikus vákuumrendszert használjuk. Szívósebessége elővákuum üzemben $8\text{ m}^3/\text{h}$, nagyvákuum üzemben az olajdiffúziós szivattyú szívócsonkján 10^{-5} torr nyomástartományban kb. 100 l/sec. A rendszer a kriosztát előtti háromjáratú vákuumszelep (típus sz.: HÜ—128) segítségével a folyadékfürdőbe merülő kísérleti kamra vákuumozására is felhasználható. A vákuumrendszer kapcsolási vázlata a 11. ábra egy részletét (9-től 11-ig terjedő tételek) képezi, elektromos kapcsolását a 9. ábrán mutatjuk be. Az ábra alapján látható, hogy a vákuumrendszer teljes védelmet nyújt az előforduló zavarok ellen, és automatikusan elvégzi a leállást. Indításához külső beavatkozás szükséges.

A kriosztát üzembeállítása és használatának tapasztalatai

Az üzembeállítás eredményessége érdekében a kriosztát készítését igen nagy gondnal végeztük, és az alábbiakra különös figyelmet fordítottunk:

1. A készülék önálló részegységeinek vákuumbiztos gáztömör keményforrasztása és a forrasztási helyek óvatos megmunkálása (csiszolása). Forrasztás előtt a felületeket pácólással fémtiszta állapotba hoztuk és zsírtalanítottuk, forrasztás után a keletkezett oxidokat leoldottuk.

2. A részegységeket összeszerelésük előtt egyenként háromszor szobahőmérsékletről a folyékony nitrogén hőmérsékletére hűtöttük. Ezt követően nyomáspróbának, hermetikussági vizsgálatnak és héliumos vákuum-lyukkeresésnek vetettük alá. A talált hibákat kijavítottuk, és a vizsgálatokat a hiba kijavítása után megismételtük.

3. A teljesen hibátlan, ellenőrzött részegységek szerelésénél gondosan ügyelünk a koncentrikus héjak egytengelyűségére.

4. Az összeillesztett részeket forrasztás előtt teljes felületükön megtisztítottuk és zsírtalanítottuk.

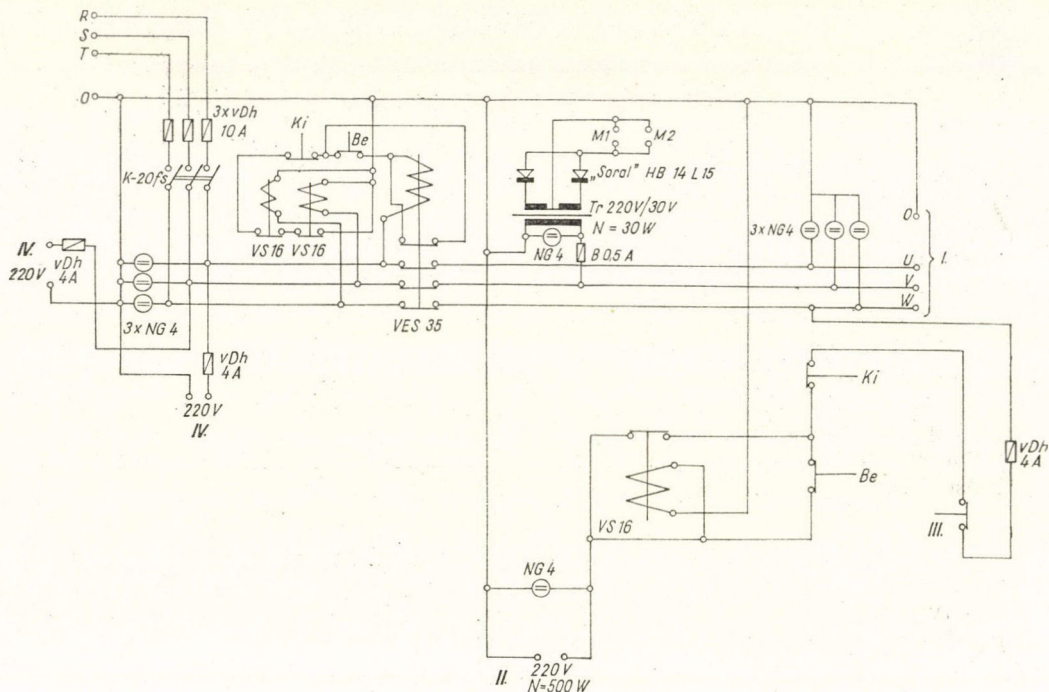
5. A használat közben keletkező hibák könnyű javítása céljából a részegysége-

ket lágyforrasztással kötöttük egymáshoz korróziót vagy későbbi gázfelszabadulást nem okozó folyatóanyagok alkalmazásával.

A kriosztát üzembeállításánál a következő műveleteket végeztük el:

a) A köpeny vákuumozása közben az aktív szén (behelyezése előtt 900°C -on felületnövelő hőkezelést végeztünk) melegítése 80°C -ig. A szobahőmérsékletű rendszerben $1 \cdot 10^{-5}$ torr vákuumot értünk el.

b) A héliumtartály légtelenítése és megtöltése héliumgázzal, folyékony nitrogén betöltés a nitrogéntartályba, az árnyékoló bura és a héliumtartály lehűlési menetének felvétele.



9. ábra. A HÜ-217 típusú félautomatikus működésű vákuumrendszer elektromos kapcsolása
 M_1 — elektromágnessel működtetett vákuumszelep; M_2 — elektromágnessel működtetett levegőző szelep; I — elővákuumszivattyú; II — diffúziósszivattyú fűtés; III — hűtővízkapcsoló; IV — vákuummérő csatlakozások

Az árnyékoló burán a nitrogéntartály alsó szintjétől 100, 275 és 450 mm-re (legtávolabbi pont) réz-konstantán termopárokkal mértük a hőmérsékletet. A különböző távolságban levő pontokon azonos időben mérhető hőmérsékletkülönbséget nem tapasztaltunk. A nitrogén betöltésétől számított 1 órán belül az árnyékoló bura $77,4^{\circ}\text{K}$ -ra hűlt.

A héliumtartály 5 óra alatt néhány fok eltéréssel felvette a folyékony nitrogén hőmérsékletét.

A vákuumköpenyben a $77,4^{\circ}\text{K}$ -os hőmérsékletű előhűtés után $1 \cdot 10^{-6}$ torr volt a vákuum értéke, és a kriosztáton levő vákuumszelep lezárása, tehát statikus

állapotban is változatlan maradt. A későbbiek folyamán — miután a kiterjedt fémfelületeken megkötött levegőmolekulákat kiszivattyúztuk — a statikus vákuum értéke közel egy nagyságrenddel megjavult.

c) Folyékony hélium betöltés és a párolgási veszteségek mérése. A kriosztát alapveszteségének megállapítására a héliumtartály felső nyílását fémfedéllel lezártuk. A záróelemen csak a hélium betöltésére és párologtatására szükséges csőcsonkok voltak elhelyezve. A folyadék felé néző belső felületére 5 cm vastag műanyaghab hőszigetelő tárcsát, a tárcsa alsó síkjára 0,5 mm vastagságú polírozott alumíniumlemezt erősítettünk. A veszteségmérés alatt a héliumfürdő csak a nyakcsövön keresztül volt összeköttetésben a szobahőmérsékletű környezettel. A párolgási veszteség értékét sok körülmény befolyásolta: a betöltött folyadék mennyisége, az aktív szén adszorber elhelyezése (hélium v. nitrogén zónán), a légnyomás és a külső hőmérséklet nagysága, a hélium tartály meghibásodása stb.

A cseppfolyós hélium betöltésének menete a 11. ábrán követhető: 1. A szállítóedényt (1) úgy helyezzük a kriosztáthoz (2), hogy a töltőcsövet (3) kényelmesen bevezethessük és kiemelhessük. Töltés előtt a szállítóedény a nyitott H3 szorítón keresztül párolog a hélium-hálózatra. A H4 és H5 zárt állapotú szorítók az áttöltéshez szükséges túlnyomást biztosító gumiballont (5), az ugyancsak zárt állapotú H6 szorító pedig a tárolóedény szállítása közben elpárologtató héliumot összegyűjtő nagyobb méretű gumiballont (már eltávolítva) csatlakoztatják. A nyitott H2 szorítón keresztül a kriosztát hélium tartálya a hélium hálózat néhány torr túlnyomása alatt áll, H1 zárt állapotban van.

2. Zárjuk H3 szorítót.

3. Kivesszük a szállítóedény (1) nyílását záró dugót, és a szabaddá vált nyílásba kb. 350—400 mm mélyen lesüllyesztjük a töltő cső szelepes végét. Ebben a helyzetben tartva 1—2 percig előhűtjük a töltőcsövet.

4. Zárjuk H2 szorítót, hogy a kriosztát töltőnyílásának nyitásakor a hálózatról ne legyen nagy héliumveszteség.

5. A töltőcsövet leengedjük a szállítóedénybe, szelepnélküli végét ezzel egyidejűleg beillesztjük a kriosztát töltőnyílásába. A csatlakozási helyeket a szállítóedénynél és a kriosztátnál egyaránt hermetikusan eltömítjük. Erre a célra a szállítóedénynél az edény tartozékát képező menetes tömszelence, a kriosztátnál paragumitömlőből levágott csődarab szolgál.

6. Nyitjuk H2 szorítót.

A művelet közben a szállítóedényben keletkező gázt H3-on keresztül a hálózatba vezetjük.

7. Zárjuk H3 és nyitjuk H4, H5 szorítókat. A szállítóedényben a gumiballon (5) összenyomásával 80—100 torr túlnyomást létesíthetünk. A nyomás mérése H6 segítségével higanymanométer köthető a szállítóedény gázterére.

A töltő cső szelepeinek nyitását úgy szabályozzuk, hogy a kriosztátban a nyomás ne emelkedjen 100 torr fölé. Értékét a rákapcsolt higanymanométer (4) jelzi.

Az áttöltéshez szükséges nyomáskülönbséget (30—80 torr) a H1 szorítónál csatlakoztatható gáztömör elővákuumszivattyúval is előállíthatjuk. Ehhez H1-et kissé, a töltőcsövön levő szelepet nagymértékben nyitni, H2-t pedig zárni kell.

8. Az áttöltés befejezése után a szállítóedényben uralkodó túlnyomást H3-on keresztül leeresztjük a hálózatba, kiemeljük a szifont, a csatlakozó nyílásokat a szállítóedényen és a kriosztáton hermetikusan elzárjuk, ellenőrizzük, hogy a kriosztát akadálytalanul párologhasson a hálózatra.

A kriosztát felső részének visszamelegedése után a folyékony nitrogén tartályt is utántöltöttük, majd a hélium és a nitrogén párologtató vezetékekre gázórákat kapcsolva megkezdjük a veszteségmérést. A leolvasott értékeket a légköri nyomás és a hőmérséklet szerint korrigáltuk. A gázvesztéseket így normálköbméterben meghatározva számoltuk a folyadékvesztiséget. A mérési eredményeket a II. táblázatban foglaltuk össze. Mérés alatt a kriosztát vákuumköpenyében zárt vákuumszeleppel sztatikus állapotban a nyomás kisebb mint $1 \cdot 10^{-7}$ torr.

II. TÁBLÁZAT

A kriosztát párologási vesztesége

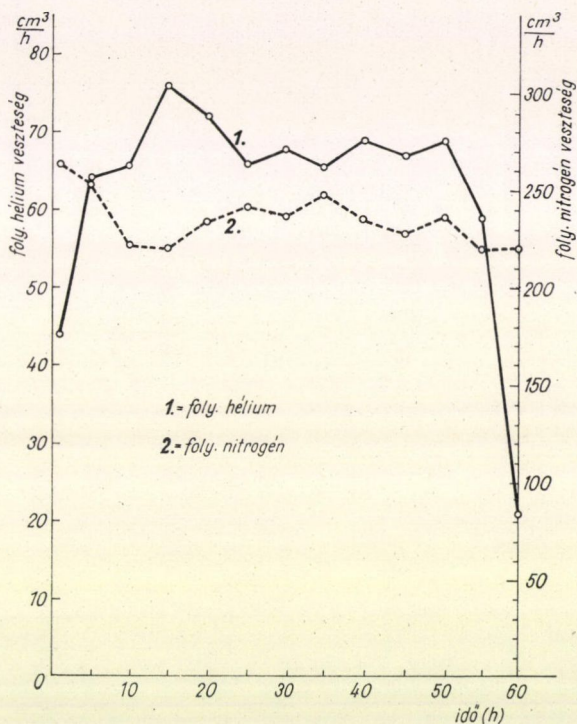
A mérés sorszáma	Betöltött foly. He mennyiség (lit)	Környezeti hőmérséklet (°C)	Légköri nyomás (torr)	A foly. He vesz.		A foly. N ₂ vesz	
				lit/h	lit/24h	lit/h	lit/24h
1	0,5	20	722	20 perc alatt elpárolgott		nem mértük	
2	1,5	20	728	0,22	—	0,15	—
3	2,8	18	722	0,18	—	0,15	—
4	4,0	18	724	0,144	3,5	0,17	4,1
5	5,3	18	726	0,267	—	0,13	—
6	2,0	20	726	0,267	—	0,14	—
7	5,3	21	720	0,24	—	0,145	—
8	3,4	22	730	0,065	1,56	0,24	5,8

Az 1—7 sorszámú méréseknél az aktív szén a hélium-tartály külső felületére volt helyezve, az adszorpciós hő a héliumot párologtatta, és a megengedettnél (max 0,1 l/h) nagyobb veszteséget okozott. Különösen megnőtt a veszteség az 5.—6.—7. mérésnél, ui. az 5. mérés kezdetén a héliumtartály meghibásodott, így a vákuumtérbe jutó héliummolekulák is adszorbeálódtak. A 8. mérés előtt az aktív szenet levettük a héliumtartályról és a nitrogén zónára helyeztük, a héliumtartály hibáját megszüntettük. A 8. mérésnél kapott eredményekkel (a párologási veszteségek változását lásd a 10. ábrán) a bemérés befejeződött és megkezdődött a berendezés használata.

A mérőhely elrendezését a 11. ábrán mutatjuk be. Eddigi kb. másfél éves használata közben a kriosztátnál és segédberendezéseinél meghibásodás nem történt. Mérések előtt a vákuumköpenyt meleg állapotban $1 \cdot 10^{-5}$ torr-ig vákuumozzuk, a folyékony nitrogén betöltése és a hélium zóna előhűtése után zárjuk a kriosztáton levő vákuumszelepet és kikapcsoljuk a vákuumrendszert. A hélium betöltése után a vákuum értéke tovább javul, a nyomás kisebb mint $1 \cdot 10^{-7}$ torr. 4,21 °K-on a kriosztát — a minta bevezetéseinek létrejövő hővezetés nagysága szerint — 60—80 órás mérési időt biztosít hélium utántöltés nélkül. 4,21 °K és 65 °K közötti hőmérsékleteknél a kísérleti kamrát a háromjáratú vákuumszelepen keresztül a vákuumrendszer segítségével $1 \cdot 10^{-5}$ torr-nál kisebb nyomáson tartjuk. A párologási veszteség ilyenkor a mintatartó alakjától, nagyságától, felületi minőségétől, hőmérsékletétől és a fűtőteljesítménytől függően alakult.

A kriosztátban — többek között — különböző típusú mélyhőmérsékletek mérésére alkalmas hőmérők összehasonlítását és kalibrálását végeztük el, továbbá meghatároztuk az Fe—Rh ötvözetek antiferromágneses—ferromágneses átalakulásának hőmérsékletét az Rh koncentráció függvényében.

Más mintaelrendezéssel ill. a mérőkamra megfelelő átalakításával a kriosztát további vizsgálatoknál (alacsony hőmérsékletű kalorimetria, szupravezető kutatás stb.) is használható.



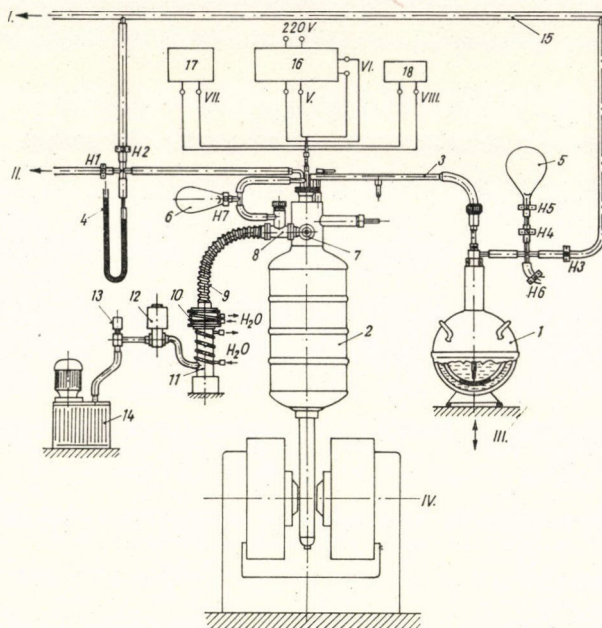
10. ábra. A párolgási veszteségek változása az idő függvényében

A párolgási veszteségek vizsgálata

A héliumtartályban létrejövő párolgást a hőbeszivárgások okozzák. Ezek a következő módon jöhetnek létre:

- a vákuumtérben maradt gáz hővezetése,
- a vákuumtérben maradt gáz áramlása,
- hőszugárzás a vákuumtéren keresztül,
- a hélium-tartály tartócsövén (nyakcső) fellépő hővezetés,
- hőszugárzás a nyakcsövön,
- a hélium-tartály vákuumtérben levő kitámasztásainak hővezetése,
- a hélium-tartály és a nyakcső belső terében létrejövő gázáramlás és végül
- a folyadék feletti gázoszlop termikus lengése.

A kriosztátban uralkodó hőmérséklet és nyomásviszonyok, továbbá a készülék ismertetett szerkezetében a felsorolt tényezők egy részének hatása elhanyagolható. A folyékony hélium $4,21^\circ\text{K}$ -os hőmérséklete mellett a vákuumköpenyben igen kicsiny nyomás jön létre, így az *a)* és *b)* szerinti hatásokat nem vesszük figyelembe. A rozsdamentes (rossz hővezető) acélból készült kiskeresztmetszetű



11. ábra. A laboratóriumi mérőhely elrendezése mágneses fázisátmenetek vizsgálatánál $4,21^\circ\text{K}$ -tól 65°K közötti hőmérsékletekre

1 — SZD-10G típusú 10 lit űrtartalmú hélium szállítóedény; 2 — HÜ-104 típusú kriosztát; 3 — folyékony hélium töltő cső; 4 — higanymanométer; 5, 6 — kisméretű gumiballon; 7 — csőmembrános vákuumszelep $\varnothing 20$ mm, típus: HÜ-129; 8 — háromjártatú vákuumszelep $\varnothing 20$ mm, típus: HÜ-128; 9 — rugalmas membráncső; 10 — vízhűtésű gőzlecsapó; 11 — olajdiffúziós szivattyú, $v=100$ lit/sec; 12 — mágnesszelep $\varnothing 20$ mm, $U=24$ V; 13 — levelegző szelep $\varnothing 1,5$ mm, $U=24$ V, típus: HÜ-97; 14 — kétfokozatú elővákuumszivattyú; 15 — hélium hálózat; 16 — hőmérséklet szabályozó (NV-218 típusú egyenfeszültségű erősítő és NV-220 típusú végfokozat);

17 — iróműves árammérő, típus: H 373-1; 18 — galvanométer

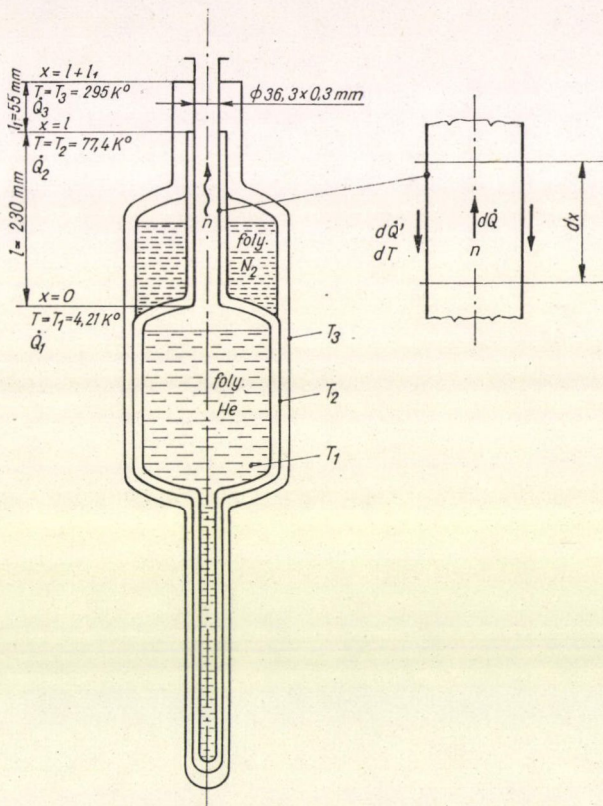
I — csatlakozás a gázharanghoz vagy nagyméretű gumiballonhoz; II — csatlakozás a gáztömör elővákuumszivattyúhoz; III — a szállítóedény mozgatása; IV — laboratóriumi elektromágnes; V — fűtőtekercs csatlakozás; VI — platina ellenálláshőmérő csatlakozás; VII — termopár csatlakozás; VIII — mérőtekercs csatlakozás

kitámasztásokon bevezetett (*f*), valamint a héliumtartály és a nyakcső belső terében kialakuló gázáramlásokkal szállított hő (*g*) hatásától az adott kriosztátnál eltekinthetünk. A héliumtartályt felfüggesztő nyakcsövön keresztül létrejövő hősugárzás (*e*) ellen jó védelmet nyújt az 5 cm vastag műanyaghabkorong, az alsó lapjára erősített 0,5 mm vastag polírozott alumíniumlemez és a nyakcső fényesre polírozott külső és belső felülete. A folyadék feletti gázoszlop az adott nyakcső méretek mellett egyet-

len hélium szintmagasságnál sem jött lengésbe, így elmarad a nyakcső kisebb hőmérsékletű alsó szakaszán a gázlengés tágulási fázisát jellemző jelentős mértékű hőleadás (h).

A kriosztát párolgási veszteségét tehát a c) és d) szerinti hatások szabják meg, az elgőzölgó folyadékból keletkező hideg gázáram és a nyakcső közötti hőátadás pedig nagymértékben befolyásolja a héliumtartály és a nyakcső csatlakozási helyének hőmérsékletét.

E tényezők vizsgálatát a cseppfolyósított gázok szállítóedényeire kidolgozott módszer [3], [4] alkalmazásával lehet elvégezni. A 12. ábra jelöléseivel a nyakcső



12. ábra. Hőmérsékletzónák és a hőátadás vizsgálata

mentén a hőmérséklet T_1 -ről T_2 -re, majd T_2 -ről T_3 -ra növekszik. A nyakcsővön létrejövő \dot{Q} hőáram a kifelé áramló hideg gáz és a cső közötti hőcsere következtében \dot{Q}_3 -ról fokozatosan \dot{Q}_2 -re, majd \dot{Q}_2 -ről \dot{Q}_1 -re csökken. A folyékony nitrogén párolgását tehát \dot{Q}_2 és a nitrogén zónára eső hőszugárzás, a cseppfolyós hélium, párolgását \dot{Q}_1 és a héliumtartályba sugárzással bevitt \dot{Q}_s hőáram szabja meg. A következőkben a héliumvesztés meghatározását mutatjuk be, ennek alapján a nitrogénvesztés nehézség nélkül számolható.

A nyakcső dx hosszúságú szakaszán a felfelé áramló hideg gáz a melegebb csőfaltól egységnyi idő alatt $d\dot{Q} = nC_p dT$ hőt vesz át. Az összefüggésben n [mol] az időegység alatt elpárolgott gázmennyiség, C_p [J/mol °K] a gáz fajhője, dT [°K] a vizsgált szakasz két vége közötti hőmérsékletkülönbség. T_1 és T között integrálva (T a nyakcső tetszőlegesen választott helyének hőmérséklete)

$$\dot{Q} - \dot{Q}_1 = nC_p(T - T_1) \quad (1)$$

Hővezetéssel dx szakaszon beáramló hő mennyisége

$$d\dot{Q}' = \frac{d}{dx} \lambda A \frac{dT}{dx},$$

amelyből — feltételezve, hogy a cső és a gáz között tökéletes a hőcsere —

$$\dot{Q}' = \dot{Q} = \lambda A \frac{dT}{dx} \quad (2)$$

A (2) egyenlet a választott pontban fellépő \dot{Q} hővezetés és a hőmérsékletgradiens között ad összefüggést; A [cm²] a csőfal keresztmetszetének területe, λ $\left[\frac{\text{mW}}{\text{cm} \cdot \text{°K}} \right]$ a cső hővezetési tényezője.

Az (1) egyenletből (2) helyettesítésével

$$\lambda A \frac{dT}{dx} = nC_p(T - T_1) + \dot{Q}_1 \quad (3)$$

λ értékét rozsdamentes acél csőre 4,21 °K és 77,4 °K közötti hőmérsékleteknél az alábbi összefüggéssel nyerhetjük.

$$\lambda = a + b(T - T_1) + bT_1. \quad (4)$$

Bevezetve még a

$$\dot{Q}_1 = g nC_p$$

jelölést, amelyből $g = \frac{\dot{Q}_1}{nC_p}$, a (3) egyenletből kifejezhető dx :

$$dx = \frac{\lambda A dT}{nC_p(T - T_1) + \dot{Q}_1} = \frac{[A(a + bT_1) + Ab(T - T_1)] d(T - T_1)}{nC_p(T - T_1) + gnC_p}$$

A számlálót és a nevezőt (nC_p)-vel osztva

$$dx = \frac{\left[\frac{A}{nC_p} (a + bT_1) + \frac{Ab}{nC_p} (T - T_1) \right] d(T - T_1)}{T - T_1 + g}, \text{ integrálva}$$

$$x = \frac{A}{nC_p} [(a + bT_1) \ln(T - T_1 + g) + b(T - T_1) - bg \ln(T - T_1 + g)]$$

$x=l$ helyen $T=T_2$ helyettesítéssel

$$l = \frac{A}{nC_p} \left\{ [a + b(T_1 - g)] \ln \left[1 + \frac{T_2 - T_1}{g} + b(T_2 - T_1) \right] \right\} [\text{cm}] \quad (5)$$

Mivel n arányos $(\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s)$ -el, az időegység alatt elpárolgó gáz moljainak számát a párolgáshő ismeretében az alábbi összefüggéssel kapjuk

$$n = \frac{\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s}{L} = \beta (\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s) [\text{mol}] \quad (6)$$

ahol: $L \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]$, a molnyi mennyiség párolgáshője;

$\beta = \frac{1}{L} \left[\frac{\text{mol}}{\text{J}} \right]$, a párolgáshő reciproka.

β pontosabb értéke: $\beta = \frac{1 - \varrho_g}{L}$;

$\varrho_g \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$ a gáz, $\varrho_f \left[\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right]$ a folyadék sűrűsége.

A (6) egyenletből $\dot{Q}_1 = gnC_p$ helyettesítéssel kifejezve:

$$\dot{Q}_s = n \left[\frac{1}{\beta} - gC_p \right] [\text{watt}] \quad (7)$$

Megjegyzendő, hogy $C_p \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}^\circ\text{K}} \right]$ egyatomos gázoknál kis nyomásoknál nem függ a hőmérséklettől.

Az eddig kapott összefüggésekkel a veszteségek számolása elvégezhető. Legérdekesebb \dot{Q}_s hatásának vizsgálata. Ehhez az (5) egyenletből kifejezzük n értékét:

$$n = \frac{A}{lC_p} \left\{ [a + b(T_1 - g)] \ln \left[1 + \frac{T_2 - T_1}{g} + b(T_2 - T_1) \right] \right\} [\text{mol}] \quad (8)$$

A (8) egyenlet n és g közötti kapcsolatot fejezi ki. Az összetartozó n és g értékekből a (7) egyenlettel meghatározható \dot{Q}_s , majd a (6) egyenlettel \dot{Q}_1 , és így korrigálható n .

A számításokban g legnagyobb értéke $g = \frac{1}{\beta C_p}$ lehet.

Ha feltételezzük, hogy a nyakcső és a kiáramló hideg gáz között nincs hőátadás, akkor

$$\int \dot{Q}_1 dx = A \int_1^2 (a + bT) dT \quad \text{és} \quad \dot{Q}_1 = \frac{A}{l} \left[a(T_2 - T_1) + \frac{b}{2} (T_2^2 - T_1^2) \right] [\text{mW}] \quad (9)$$

A kriosztátra vonatkozóan g legnagyobb értékével $\dot{Q}_s = 0$ feltételezés mellett

határozzuk meg \dot{Q}_1 hőáramot. Ezután \dot{Q}_s hőáramot is kiszámítjuk, és a párolgási veszteség mérésével kapott értékének ismeretében helyesbítjük \dot{Q}_1 -et.

Kiindulási adatok:

$$A = 0,31 \text{ cm}^2; \quad l = 23 \text{ cm}; \quad a = -2,28; \quad b = 1,2; \quad C_p = 20,8 \frac{\text{J}}{\text{mol}^\circ\text{K}};$$

$$L = 81,6 \text{ J/mol} = 1,07 \text{ kcal/Nm}^3; \quad \beta = 0,0107 \text{ mol/J};$$

$$\rho_g = 15,92 \text{ kg/m}^3; \quad \rho_f = 125,56 \text{ kg/m}^3; \quad T_1 = 4,21^\circ\text{K}; \quad T_2 = 77,4^\circ\text{K};$$

$$g = 4,485, \quad \dim g = [^\circ\text{K}].$$

I. Feltételezzük, hogy a kiáramló hideg gáz és a nyakcső között nincs hőátadás, továbbá $\dot{Q}_s = 0$. A (9) egyenlettel számolva

$$\dot{Q}_1 = 4630 \cdot 10^{-2} \text{ mW} = 46,3 \cdot 10^{-3} \text{ watt}.$$

24 óra alatt bevezetett hőmennyiség:

$$Q_1 = 4000 \text{ Watt sec} = 956 \text{ cal} = 0,956 \text{ k cal}.$$

Figyelembe véve, hogy 1 Nm³ hélium gáz 1,44 l folyékony hélium elpárolgásával keletkezik, a párolgási veszteségre 1,29 l/24 h = 1290 cm³/24 h értéket kapjuk.

II. A gáz és a nyakcső között tökéletes hőcserét és $\dot{Q}_s = 0$ esetet feltételezve az (5) egyenlettel meghatározzuk az elpárolgó mennyiséget, majd a (6) egyenlettel \dot{Q}_1 nagyságát:

$$n = 525 \cdot 10^{-4} \text{ mol};$$

$$\dot{Q}_1 = \frac{n}{\beta} = 4900 \cdot 10^{-3} \text{ mW} = 4,9 \cdot 10^{-3} \text{ watt}.$$

24 óra alatt bevezetett hőmennyiség:

$$Q_1 = 424 \text{ watt sec} = 101 \text{ cal} = 0,101 \text{ k cal}.$$

Ebből a 24 óra elpárolgó folyadék mennyisége 0,136 l = 136 cm³.

A mért tényleges párolgási veszteség 0,065 liter folyékony hélium óránként, azaz 1,56 liter folyékony hélium 24 óra alatt. A vezetéssel és sugárzással bevitt hő valódi értéke:

$$Q_1 + Q_s = 1,16 \text{ k cal/24 h}, \text{ amely } 56 \cdot 10^{-3} \text{ watt hőáramnak felel meg.}$$

Hősugárzás útján a héliumtartály felületére jutó hőáramot a Stefan—Boltzmann törvény alapján határozzuk meg, amely a kriosztát henger-, ill. gömbszimmetrikus felületeinél

$$q_s = \frac{\dot{Q}_s}{A_1} = \sigma \frac{1}{\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right) + \left(\frac{A_1}{A_2}\right) \left[\left(\frac{1}{\varepsilon_2}\right) - 1\right]} (T_2^4 - T_1^4) [\text{watt/cm}^2]$$

alakban írható [5], [6].

Az összefüggésben szereplő mennyiségek:

$$A_1 = 2900 \text{ cm}^2, \text{ a héliumtartály külső felülete};$$

$$A_2 = 3690 \text{ cm}^2, \text{ az árnyékoló bura belső felülete};$$

$A_1/A_2=0,786$, a felületviszony;

$\varepsilon_1=0,05$, a héliumtartály felületének emissziós tényezője [5];

$\varepsilon_2=0,020$, az árnyékoló bura felületének emissziós tényezője [5];

$T_1=4,21^\circ\text{K}$, a héliumtartály hőmérséklete;

$T_2=77,4^\circ\text{K}$, az árnyékoló köpeny hőmérséklete;

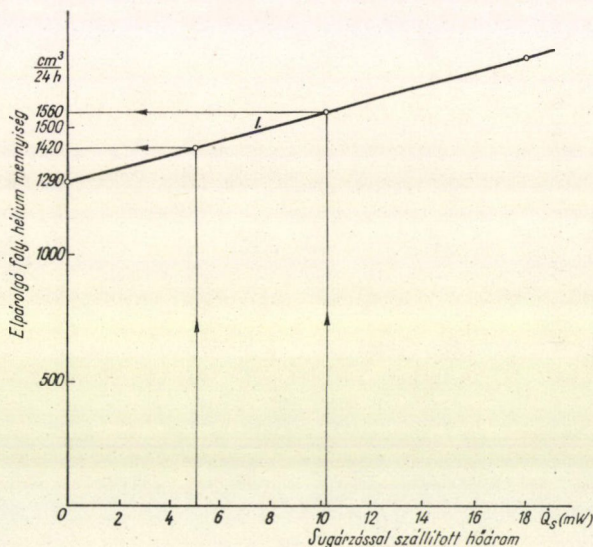
$\sigma=4,96 \text{ k cal/m}^2\text{h } ^\circ\text{K}^4=5,77 \cdot 10^{-12} \text{ watt/cm}^2 \text{ } ^\circ\text{K}^4$.

Behelyettesítés után $\frac{\dot{Q}_s}{A_1}=3,50 \cdot 10^{-6} \text{ watt/cm}^2$, amelyből

$$\dot{Q}_s = 10,2 \cdot 10^{-3} \text{ watt.}$$

\dot{Q}_1 számolt értékével $\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s = 56,5 \cdot 10^{-3} \text{ watt}$ adódik, tehát megállapítható, hogy I.-nél tett feltételezésünk a valóságos viszonyok jó közelítését jelenti.

A sugárzás hatását vizsgálva (13. ábra) látjuk, hogy a párolgási veszteség



13. ábra. A hőszugárzás hatása a párolgási veszteség növekedésére

$(\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s)$ -el arányosan változik, és a hőcsere kedvező befolyása nem érvényesül. Ha \dot{Q}_s értéke felére csökkenne, amit a héliumtartály és a $77,4^\circ\text{K}$ -os ernyő közé helyezett további árnyékoló burával lehetne elérni —, a párolgási veszteségben kb. 10%-os csökkenés mutatkozna.

Az I. és II. szerinti feltételezés alapján meghatározott párolgási veszteség összehasonlításából megállapítható, hogy hőcsere nélkül mintegy 9,5-ször nagyobb a nyakcső hőbevezetésével elpárolgotatott folyadékmennyiség. A jó hőcsere érdekében viszont fontos, hogy az elpárolgó mennyiség eleve kicsiny legyen. Ebben az esetben ugyanis a héliumtartályból távozó hideg hélium gáz áramlási sebessége

kisebb, így hosszabb ideig tartózkodik a nyakcsőben, és jó hővezetőképessége révén nagyobb hőmennyiséget von el a melegebb csőfaltól.

Kicsiny párolgási veszteség elérése céljából kell a nyakcső átmérőjét és falvastagságát minimálisra megválasztani, és jó reflektáló tulajdonságú — a folyékony nitrogén hőmérsékletére hűtött —, árnyékoló ernyőt alkalmazni a hősugárzás ellen.

\dot{Q}_s kicsiny értékének különösen a II. esetben van nagy jelentősége: amíg $\dot{Q}_s \equiv \dot{Q}_1 (\dot{Q}_s = 0)$, az elgőzölgés mértéke ($\dot{Q}_1 + \dot{Q}_s$) növekedésével csak lassan változik; $\dot{Q}_s = \dot{Q}_1 (\dot{Q}_s = 0)$ határnál a párolgási veszteség csupán 20%-kal több a $\dot{Q}_s = 0$ -val kapott értékénél. Ezt az igen kedvező állapotot az ismertetett kriosztátnál a még lehetséges minimális nyakcsőméretek mellett sem lehet elérni.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet fejezem ki *Pintér Attila*, *Pozsgai Gyula* és *Rusz Béla* munkatársaimnak a kriosztát és segédberendezései elkészítésében és bemérésében kifejtett gondos munkájukért, továbbá *Tarnóczy Tivadar* és *Tóth József* fizikusoknak a berendezés használata közben szerzett tapasztalatok átadásáért.

IRODALOM

- [1] *Johnson, Matthey CO.* mérési eredményei, 1964.
- [2] *Balla J., Tompa K., Tóth F.*, Mérés és Automatika, 1966. 10.
- [3] Report of the Oxygen Research Committee, London, 1923.
- [4] *F. E. Hoare, L. C. Jackson, N. Kurti*: Experimental Cryophysics, London, 1961.
- [5] *Scott R. B.*: Cryogenic Engineering, Boulder, Colorado 1959.
- [6] *Chelton, Mann*: Cryogenic Data Booh, Boulder, Colorado 1956.

MEZON 35+1 TERMÉSZETRAJZ*

MARX GYÖRGY

ELTE, Elméleti Fizikai Intézet,

TÓTH KÁLMÁN

MTA Központi Fizikai Kutatóintézete

Azóta, hogy 1947-ben a π -mezonokat felfedezték, az elemi részecskék addig oly könnyen áttekinthető világa hihetetlenül bonyolulttá vált. Az úgynevezett elemi részecskék száma ma már jóval túlhaladja a százat. Tulajdonságaik, kölcsönhatásaik megértése a mai fizika egyik legfontosabb problémája, s állandó feladat a rohamosan növekvő kísérleti anyag összevetése a legújabb elméleti feltevésekkel. Ezen a helyen a pszeudoskalár és vektormezonok bomlásaira vonatkozóan próbáljuk ezt elvégezni. A pszeudoskalár mezonok többsége ugyan ma már „rég” részecskének számít, ismereteinket mégis még mindig új, szenzációként ható felfedezésekkel gazdagítják. (K_2^0 CP-sértő bomlása, az η bomlásaiban megjelenő esetleges C sértés.) A vektormezonok még viszonylag új részecskék, de a sok esetben pontatlan mérési adatok is igen jelentős információként szolgálnak az elmélet számára.

Az elemi rész fizika utóbbi években történt fejlődése következtében egy erősen kölcsönható részecskékre vonatkozó áttekintés vezérfonalául szinte kizárólagosan az unitér szimmetriák kell, hogy szolgáljanak. Rendszerező csoportként az SU(6) látszik a legjobbnak, a pszeudoskalár és vektormezonok közismerten egy 35 és egy 1 dimenziós reprezentációba sorolhatók. A 35-be tartozik 8 pszeudoskalár

($K^\pm, K^0, \bar{K}^0, \pi^\pm, \eta$: SU(3) oktet) és 9 vektormezon ($K^{*\pm}, K^{*0}, \bar{K}^{*0}, \varrho^\pm, \omega, \varphi$: SU(3) oktet és szingulett), az SU(6) szingulett pedig az X pszeudoskalár mezon. Ennek az osztályozásnak a számunkra leglényegesebb következménye az, hogy érthetővé teszi a lényeges $\omega - \varphi$ keveredés mellett az $\eta - X$ keveredés jelentéktelen nagyságát. (A későbbiekben az $\omega - \varphi$ keveredést ideálisnak tesszük fel: az SU(3) oktet tag: $\varphi^8 = \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi - \sqrt{\frac{1}{3}} \omega$, a szingulett $\omega^0 = \sqrt{\frac{2}{3}} \omega + \sqrt{\frac{1}{3}} \varphi$, $\eta - X$ keveredést egyáltalán nem tételezünk fel). A bomlási folyamatok tárgyalásánál fő szempontunk az SU(3) szimmetria alakalmazása lesz, az SU(6)-ot csak akkor használjuk, ha az SU(3)-hoz képest új információt tartalmaz. Az egyes folyamatokat a kölcsönhatás típusa szerint csoportosítjuk. Célunk minden esetben a bomlási arányok reprodukálása lesz, nem foglalkozunk a tömegek, alakfaktorok (K-mezonok!) stb. problémájával, valamint a $K_2^0 \rightarrow \pi\pi$ CP-sértő bomlással.**

A kvantumszámok, tömegek, élettartamok, bomlási arányokra vonatkozó valamennyi kísérleti adatot [1]-ből vesszük.

Az egész analízis alapjául Marx Györgynek a IV. Magyar Elméleti Fizikai Iskolán tartott előadása szolgál.

* Az 1966. évi Elméleti Fizikai Iskolán elhangzott előadás nyomán.

Érkezett 1966. okt. 20.

** A CP-sértéssel külön előadás részletesen foglalkozik.

I. A pszeudoskalár mezonok gyenge bomlásai

A végállapotban szereplő részecskék fajtáját tekintve két fő csoportra sorolhatók:

a) leptonos folyamatok: a bomlástermékek között könnyű részecskék (e, μ, ν) is vannak,

b) nem leptonos folyamatok: a végállapotot kizárólag hadronok alkotják.

Az egyes bomlási típusok tárgyalását a kevésbé problematikus a) csoporttal kezdjük. A megértendő legfontosabb kísérleti eredmények: a kezdeti és végállapotban levő hadronok kvantumszámaira a következő kiválasztási szabályok érvényesek:

$$1. \text{ vagy } \Delta S = 0 \quad \Delta T_3 = \pm 1$$

$$2. \text{ vagy } \Delta S = \pm 1, \quad \frac{\Delta S}{\Delta Q} = \pm 1 \quad |\Delta T| = \frac{1}{2}$$

Ezenkívül a feltételezendő kölcsönhatásnak számot kell adnia a mért elágazási arányokról. (A bomlástermékek egyéb tulajdonságait, mint szög- és energiaeioszlás, polarizációs viszonyok, nem tárgyaljuk.)

A H_w gyenge kölcsönhatási Hamilton-operátort áram \times áram struktúrájának képzeljük el. A teljes J_μ gyenge áram a leptonok j_μ és a hadronok $j_{H\mu}$ gyenge áramából tevődik össze. Feltételezzük a $\mu - e$ univerzalizációt, így

$$j_\mu = \bar{\nu} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) e + \bar{\nu} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \mu$$

(Itt és a továbbiakban is nem teszünk különbséget a kétféle neutrínó között, mindkettő tömegét nullának vesszük). A hadronok gyenge áramát is egy vektor és egy axiálvektor részből összetevődőnek gondoljuk el. A vektorrészeztől feltesszük, hogy megmaradó áram (CVC hipotézis). A CVC megválasztásához az erős kölcsönhatások SU(3) szimmetriáját vesszük alapul.

Konkrét példaként válasszunk egy

$$\mathcal{L} = \sum_{a=1}^3 \bar{q}^a (\gamma \cdot \partial + m_q) q_a + g \sum_{a=1}^3 (\bar{q}^a \bar{q}_a)^2$$

Lagrange-függvénnyel jellemzett kvark-modellt [2]. Minthogy \mathcal{L} SU(3) szimmetrikus, le tudunk belőle származtatni egy megmaradó vektor áram oktetet:

$$V_\mu^i(x) = i\bar{q}(x) \gamma_\mu \lambda_i q(x), \quad i = 1, 2, \dots, 8$$

Kiválasztási szabályainknak nyilvánvalóan úgy tudunk eleget tenni, ha

$$j_{H\mu} = x(V_\mu^1 + iV_\mu^2) + y(V_\mu^4 + iV_\mu^5) + x'(A_\mu^1 + iA_\mu^2) + y'(A_\mu^4 + iA_\mu^5).$$

Itt $A_\mu^i(x) = i\bar{q}(x) \gamma_\mu \gamma_5 \lambda_i q(x)$ az axiálvektor áram. Az x, x', y, y' — CP invariancia miatt valós — állandók, az oktet komponensek súlyát határozzák meg $j_{H\mu}$ -ban. A mezonokat mint kvark-antikvark kötött állapotokat elképzelve közvetlenül látható, hogy — legalábbis kvalitatíve — ilyen $j_{H\mu}$ -vel az összes leptonos folyamatot le tudjuk írni. A modellt a továbbiakban nem használjuk, de általános eredménynek tekintjük a $j_{H\mu}$ -t felépítő tagok SU(3)-transzformációs tulajdonságait, és

$$j_{H\mu} = \cos \Theta (j_\mu^{(0)} + g_\mu^{(0)}) + \sin \Theta (j_\mu^{(1)} + g_\mu^{(1)})$$

alakban írjuk a továbbiakban a mezonok gyenge áramát. $j_\mu^{(0)}$ és $g_\mu^{(0)}$ úgy transzformálódnak, mint a mezonoktett π^+ eleme, $j_\mu^{(1)}$ és $g_\mu^{(0)}$ mint a K^+ eleme. $j_\mu^{(0)}, j_\mu^{(1)}$ vektorok, $g_\mu^{(0)}$ és $g_\mu^{(1)}$ pedig pszeudovektor. A felső 0, illetve 1 index az illető tag által előidézett ritkaságváltozásra utal. Cabibbo [3] nyomán feltételezzük, hogy $x = x' = \cos \Theta$, $y = y' = \sin \Theta$.

És végül, a leptonos bomlásokat leíró Hamilton-operátor:

$$H_W = \frac{f}{\sqrt{2}} [\bar{e} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \nu + \bar{\mu} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \nu] [\cos \Theta (j_\mu^{(0)} + g_\mu^{(0)}) + \sin \Theta (j_\mu^{(1)} + g_\mu^{(1)})] + \text{h. c.} \quad (1)$$

1.

$$\pi^\pm \rightarrow \mu^\pm \nu \quad K^\pm \rightarrow \mu^\pm \nu$$

$$\pi^\pm \rightarrow e^\pm \nu \quad K^\pm \rightarrow e^\pm \nu$$

bomlások. Konkrétan a $\pi^+ \rightarrow e^+ \nu$ esetet nézzük. A bomlási mátrixelem:

$$\mathfrak{M} = \bar{\mu}_e \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \nu_v \langle 0 | g_\mu^{(0)} | \pi^+ \rangle \cdot \frac{f}{\sqrt{2}} \cos \Theta$$

Az, hogy a bomlás a természetben létezik, mutatja, hogy az axiávektor áramra nem állhat fenn szigorú megmaradás. Ha ugyanis megmaradási tétel igaz, akkor $0 = \langle 0 | \partial_\lambda g_\lambda^{(0)} | \pi \rangle = q_\lambda \langle 0 | g_\lambda^{(0)} | \pi \rangle$, a vizsgált bomlás tiltott lenne. Minthogy nyilvánvalóan $\langle 0 | g_\mu^{(0)} | \pi \rangle = q_\mu^\pi + \langle 0 | M_1^2 | \pi^+ \rangle = c q_\mu^{\pi^+}$, ahol M_1^2 , a mondottak szerint úgy transzformálódik, mint π^+ , c szám és $q_\mu^{\pi^+}$ a pionimpulzus, (1) ugyanazt a mátrixelemet adja, mint $\frac{g}{m_\pi} = \frac{fc}{\sqrt{2}} \cos \Theta$ jelölés mellett a szokásos [4]

$$H = \frac{g}{m_\pi} \bar{e} \gamma_\mu (1 + \gamma_5) \nu \partial^\mu \pi + \text{h. c.}$$

Hamilton-operátor. Ez viszont a következő bomlási valószínűséget adja:

$$\Gamma(\pi^+ \rightarrow e^+ \nu) = \frac{g^2}{4\pi} m_\pi \left(\frac{m_e}{m_\pi} \right)^2 \left(1 - \frac{m_e^2}{m_\pi^2} \right)^2. \quad (2)$$

És így

$$\frac{\Gamma(\pi^+ \rightarrow e^+ \nu)}{\Gamma(\pi^+ \rightarrow \mu^+ \nu)} = \left(\frac{m_e}{m_\mu} \right)^2 \cdot \left(\frac{m_\pi^2 - m_e^2}{m_\pi^2 - m_\mu^2} \right)^2 = 1,29 \cdot 10^{-4} \quad (3)$$

ami igen jól egyezik a mért $\sim 1,24 \cdot 10^{-4}$ bomlási aránnyal. Ez az igen kicsi érték is a leptonáram $V-A$ jellegét támasztja alá. A π^+ -mezon nyugalmi rendszerében vizsgálva ugyanis a ν és e^+ vagy μ^+ ellentétes irányban, az impulzusmomentum megmaradás következtében a sebességükhöz képest azonos spinállással kell, hogy kirepüljenek. ν helicitása -1 , $\bar{u}_e(1 - \gamma_5)$ viszont $+1$ helicitású pozitront (illetve μ^+ -t ír le). Annak a valószínűsége, hogy -1 helicitású elektron emittálódjék $\left[1 - \left(\frac{v_e}{c} \right)^2 \right] \approx \left(\frac{2m_e}{m_\pi} \right)^2$ -tel arányos. A sokkal nagyobb tömegű, így nem relativisztikus sebességgel emittálódó müonokra ez a faktor sokkal nagyobb. Ez okozza (3)-ban az erős eltolódást a $\pi \rightarrow \mu \nu$ bomlások javára.

Az alapul vett (1) Hamilton-operátor két paramétert (f , Θ) tartalmaz. Mindkettő meghatározható a $\pi \rightarrow \mu\nu$, $K \rightarrow \mu\nu$ bomlások mért adataiból. Minthogy a π^+ bomlásai között a $\mu\nu$ módus aránya gyakorlatilag 100%:

$$\tau(\pi^+) = \frac{1}{\Gamma(\pi^+ \rightarrow \mu^+\nu)} = 2,55 \cdot 10^{-8} \text{ sec}$$

és adódik, hogy $\frac{g^2}{4\pi} = 1,76 \cdot 10^{-15}$. Ugyanúgy, mint a $\pi^+ \rightarrow e^+\nu$ esetben:

$$\langle 0 | g_\mu^{(1)} | K^+ \rangle = g_\mu^{K^+} \langle 0 | M_1^3 | K^+ \rangle,$$

és az SU(3) szimmetria feltételezése következtében:

$$\langle 0 | M_1^2 | \pi^+ \rangle = \langle 0 | M_1^3 | K^+ \rangle$$

Így egyrészt adódik a (3)-nak megfelelő képlet alapján, hogy $\Gamma(K^+ \rightarrow e^+\nu)$: $\Gamma(\pi^+ \rightarrow \mu^+\nu) = 2,57 \cdot 10^{-4}$, ami a kísérleti $< 1,6 \cdot 10^{-3}$ adatnak megfelel, másrészt

$$\frac{\Gamma(K^+ \rightarrow \mu^+\nu)}{\Gamma(\pi^+ \rightarrow \mu^+\nu)} = \text{tg}^2 \Theta \frac{m_k}{m_\pi} \left[\frac{1 - \left(\frac{m_\mu}{m_K}\right)^2}{1 - \left(\frac{m_\mu}{m_\pi}\right)^2} \right]^2 = \frac{63,2\%}{100\%} \cdot \frac{2,55 \cdot 10^{-8} \text{ sec}}{1,23 \cdot 10^{-8} \text{ sec}}$$

Innen $\Theta = 0,25$. f meghatározására a Goldberger—Treimann-relációt használjuk fel [5]:

$$2M\alpha \approx cG\sqrt{2} \quad (4)$$

ahol M a nukleontömeg; α az n β -bomlásából ismert: a p és n vektor és axiálvektor csatolási állandójának a hányadosa $\alpha \approx 1,18$; G a pion-nukleon csatolási állandó: a $\pi-N$ szórásokból ismert értéke $G^2/4\pi = 14$. Ezeket az adatokat beírva (4)-be:

$$f \approx 1,21 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{1}{M^2}$$

illetve $f \cos \Theta = 1,18 \cdot 10^{-5} \frac{1}{M^2}$ ami a Fermi-csatolási állandó $f_F = 1,023 \cdot 10^{-5} \frac{1}{M^2}$ értékével igen jól egyezik.

2.

$$\begin{array}{lll} \pi^\pm \rightarrow \pi^0 e^\pm \nu & K^\pm \rightarrow \pi^0 \mu^\pm \nu & K_2^0 \rightarrow \pi^\mp \mu^\pm \nu \\ & K^\pm \rightarrow \pi^0 e^\pm \nu & K_2^0 \rightarrow \pi^\mp e^\pm \nu. \end{array}$$

Szembeeszköz, hogy a kísérleti adatokból a $K_1^0 \rightarrow \pi l \nu$ bomlások hiányoznak, bár semmi nem tiltja őket. Az oka feltehetően az igen kicsinek várható elágazási arány. CP invariancia következtében ugyanis:

$$\Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^- l^+ \nu) = \Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^+ l^- \nu) = \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^- l^+ \nu) = \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^+ l^- \nu),$$

amiből az adódik, hogy

$$\frac{\Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^\pm l^\mp \nu)}{\Gamma(K_1^0)} = \frac{\Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^\pm l^\mp \nu)}{\Gamma(K_2^0)} \cdot \frac{\tau(K_1^0)}{\tau(K_2^0)} \approx \frac{2 \cdot 10^{-2} \%}{2,5 \cdot 10^{-2} \%} \quad \begin{array}{l} l = \mu \\ l = e \end{array}$$

Minthogy az előzőekben az f és Θ paramétereket már meghatároztuk, közvetlenül

a bomlási valószínűségek megadására van lehetőségünk. Pl. a $\pi^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu$ bomlásra az átmeneti mátrixelem:

$$\mathfrak{M} = \frac{f \cos \Theta}{\sqrt{2}} \bar{u}_e \gamma_\mu (1 + \gamma_5) v_\nu \langle \pi^0 | j_\mu^{(0)} | \pi^+ \rangle = f \cos \Theta \bar{u}_e \gamma_\mu (1 + \gamma_5) v_\nu (p_\mu^{\pi^+} + p_\mu^{\pi^0}).$$

A háromrészesekés fázistérre való integrálás után:

$$\Gamma(\pi^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu) = \frac{f^2 \cos^2 \Theta}{240 \pi^3} \left(1 + \frac{m_{\pi^0}}{m_{\pi^+}}\right)^3 (m_{\pi^+} - m_{\pi^0})^5 \left[\sqrt{1-x^2} \left(1 - \frac{9}{2}x^2 + 4x^4 + \frac{15}{2}x^4 \log \left(\frac{1 + \sqrt{1-x^2}}{x} \right) \right) \right] \quad (5)$$

ahol

$$x = \frac{m_e}{m_{\pi^+} - m_{\pi^0}}.$$

$f \cos \Theta = f_F$ -et használva (5)-ből:

$$\tau(\pi^+) \Gamma(\pi^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu) = 1,06 \cdot 10^{-8}.$$

A megfelelő kísérleti adat: $(1,11 \pm 0,08) \cdot 10^{-8}$, az egyezés a CVC elmélet egyik legszebb eredménye.

A Cabibbo-szög meghatározására ismét van — az előzőtől független — lehetőségünk:

$$\begin{aligned} \langle \pi^0 | j_{H\mu} | \pi^+ \rangle &= C \cos \Theta (p_{\pi^0} + p_{\pi^+})_\mu \\ \langle \pi^0 | j_{H\mu} | K^+ \rangle &= \frac{1}{2} C \sin \Theta (p_{\pi^0} + p_{K^+})_\mu. \end{aligned} \quad (6)$$

Itt a mátrixelemek viszonyának megállapításához tekintetbe vettük, hogy a $\langle \pi^0 | j_{H\mu} | \pi^+ \rangle$, illetve $\langle \pi^0 | j_{H\mu} | K^+ \rangle$ mátrixelemek az impulzusátadáستól eltekintve azonosak a $\langle 0 | j_{H\mu} | \pi^0 \pi^+ \rangle$, illetve $\langle 0 | j_{H\mu} | \pi^0 K^+ \rangle$ mátrixelemekkel és, hogy a mezonokra Bose-statisztika érvényes, úgyhogy $8 \otimes 8$ kiredukálásánál a 8_f -nek megfelelő Clebsch—Gordan koefficienseket kell használnunk [6]. Így a két bomlás aránya, felhasználva (5)-öt is:

$$\frac{\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu)}{\Gamma(\pi^+ \rightarrow \pi^0 e^+ \nu)} = \frac{1}{4} \tan^2 \Theta \frac{\left(1 + \frac{m_{\pi^0}}{m_{K^+}}\right)^3}{\left(1 + \frac{m_{\pi^0}}{m_{\pi^+}}\right)^3} \frac{(m_{K^+} - m_{\pi^0})^5}{(m_{\pi^+} - m_{\pi^0})^5},$$

amiből $\Theta = 0,26$. A korábban kapott $\Theta = 0,25$ -dal való elég jó egyezés alátámasztja azt, hogy H_μ -be az áramok vektor, illetve axiálvektor részét azonos csatolási állandóval írjuk. Másrészt a különbség tulajdonítható az egzakt SU(3) szimmetriától való eltérés a vektor- és axiálvektor csatolási állandót különbözőképpen módosító hatásának.

Az (1) alatt felírt Hamilton-operátor mellett szól a $K_2^0 \rightarrow \pi^- l^+ \nu$ $K^+ \rightarrow \pi^0 l^+ \nu$ bomlások összehasonlítása is:

$$\begin{aligned} \langle \pi^0 | j_{H\mu} | K^+ \rangle &= \frac{1}{2\sqrt{3}} a (p_{\pi^0} + p_{K^+})_\mu \\ \langle \pi^- | j_{H\mu} | K_2^0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} a (p_{\pi^-} + p_{K_2^0})_\mu \end{aligned}$$

Elhanyagolva a semleges és töltött mezonok tömegkülönbségeit a fázisterek is azonosak, így $\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0 l^+ \nu) = \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^- l^+ \nu)$ várható elméletileg. A kísérleti adat μ -bomlásra:

$$\frac{\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0 \mu^+ \nu)}{\Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^- \mu^+ \nu)} = 1, 2,$$

ami elfogadható egyezés. Hasonló eredmény adódnék az $l=e$ esetben is.

A leptonos bomlások tárgyalását befejezve felhívjuk a figyelmet egy a hadron gyenge áram $\cos \Theta(j_\mu^{(0)} + g_\mu^{(0)}) + \sin \Theta(j_\mu^{(1)} + g_\mu^{(1)})$ alakjából adódó érdekességre. Tudjuk, hogy az SU(3)-at sértő középérős kölcsönhatás szétválasztja az egy SU(3) multipletten belüli, különböző izospinű multipletteket, kitüntetve ezáltal egy irányt az SU(3) térben (legyen ez a 3. tengely). Az elektromágneses kölcsönhatás, amely az elektromos töltést definiálja, ismét kitüntet egy irányt (1. tengely). A hadron gyenge áram, vagyis a gyenge kölcsönhatások szempontjából viszont nem a már rögzített 2. tengely iránya, hanem egy ehhez képest az 1. tengely körüli Θ szögű elforgatással kapott 2' irány van kitüntetve. SU(3) sértő középérős kölcsönhatás hiányában ez azt jelentené, hogy π^+ és K^+ helyett $\pi^+ \cos \Theta + K^+ \sin \Theta$ lenne elemi részecske.

Nem leptonos gyenge bomlások

Az alapvető kísérleti tapasztalat: valamennyi bomlásban $\Delta S = \pm 1$, és a $K^+ \rightarrow 2\pi$ bomlás kivételével $|\Delta \vec{T}| = \frac{1}{2}$. Ezeket a bomlásokat az áram \times áram alakban feltételezett kölcsönhatás $H'_w = j_H^\dagger j_H$ része írhatja le. H'_w SU(3) struktúrája: azonos oktettek szorzataként írtuk fel, így a benne előforduló irreducibilis komponensek 1, 8_d és 27-be tartozhatnak. A kiválasztási szabályok arra mutatnak, hogy 1 szerint transzformálódó része nincs H'_w -nek. A $|\Delta \vec{T}| = \frac{1}{2}$ folyamatok erős túlsúlyának a magyarázatára a $|\Delta \vec{T}| = \frac{3}{2}$ folyamatokkal szemben egy lehetőség az oktett dominancia feltételezése. A CP invariancia megkövetelése azt adja, hogy H'_w -ben 8_d -nek a K^0 típusú tagja szerepel [7].

Annak ellenére, hogy H'_w SU(3) transzformációs jellegét így igen jól körülhatároltuk, a helyzet nem megnyugtató, mert

1. a $|\Delta \vec{T}| = \frac{1}{2}$ bomlások túlsúlyának magyarázatához nem szükséges az oktett-dominancia feltételezése;
2. ha az oktett-dominanciát feltesszük, ez egzakt SU(3) esetén megtiltja a $K_1^0 \rightarrow 2\pi$ bomlásokat, éppen amelyek a feltevés fő indítékául szolgáltak [8].

H'_w SU(3) transzformációs tulajdonságait ezért a bomlások vizsgálatánál nem használjuk fel. Fő szempontunk a $|\Delta \vec{T}| = \frac{1}{2}$ kiválasztási szabály érvényesítése lesz.

1. $K \rightarrow 2\pi$ bomlások

A lehetséges CP invariáns bomlások: $K_1^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0$, $K_1^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$, $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ (A CP sértő $K_2^0 \rightarrow \pi^+ \pi^-$ bomlással ezen a helyen nem foglalkozunk.)

Impulzuszmomentum-megmaradás és Bose-statisztika miatt a 2π végállapotok izotóp-spin részének szimmetrikusnak kell lenni. A K_1^0 bomlásokra ez a $|\Delta \vec{T}| = \frac{1}{2}$ szabállyal együtt izotóp szingulett végállapotot eredményez.

Mint ahogy a π mezonok SU(2)-triplettet alkotnak:

$$|\pi^+\pi^-\rangle = |11,1-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|10\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|20\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|00\rangle$$

$$|\pi^0\pi^0\rangle = |10,10\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|20\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|00\rangle$$

Így a két K_1^0 bomlás mátrixeleme megegyezik. Figyelembe véve, hogy a $K_1^0 \rightarrow 2\pi^0$ esetben a végállapotban két azonos részecske van, a fázisterek viszonya ~ 2 , azaz:

$$\Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^+\pi^-) : \Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^0\pi^0) = 2.$$

A mért bomlási arány: $\frac{68,5\%}{31,5\%} = 2,2$ elég jól egyezik az elméleti becsléssel.

A $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0$ esetben a végállapotra $T_3=1$, ami nem enged meg izotóp szingulett végállapotot. Így a $|\Delta\vec{T}|=\frac{1}{2}$ szabály mellett ez a folyamat tiltott. A mégis megvalósuló $|\Delta\vec{T}|=\frac{3}{2}$ átmenetet tulajdoníthatjuk elektromágneses korrekciók hatásának. Ekkor azonban

$$\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0) : \Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^0\pi^0) \sim \frac{1}{137^2} \sim 10^{-5}$$

lenne várható, ami túl kicsi a tapasztalt

$$\frac{\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0\pi^+)}{\Gamma(K_1^0 \rightarrow \pi^0\pi^0)} = \frac{21,3\%}{31,5\%} \cdot \frac{0,881 \cdot 10^{-10} \text{ sec}}{1,229 \cdot 10^{-8} \text{ sec}} \sim 10^{-3}$$

bomlási arányhoz képest. Kvalitatív magyarázatként feltételezhetjük az oktett-dominanciát, és azt, hogy a $K_1^0 \rightarrow 2\pi$ átmeneteket egy SU(3) sértő, $\sim 1/10$ csatolási állandójú középerős kölcsönhatás okozza [7], [9].

2. $K \rightarrow 3\pi$ bomlások

A CP-invariancia által megengedett bomlások:

$$K^+ \rightarrow \pi^+\pi^+\pi^-, K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0\pi^0, K_2^0 \rightarrow \pi^0\pi^0\pi^0, K_2^0 \rightarrow \pi^+\pi^-\pi^0.$$

A 2π bomlásokhoz képest kis hányadban fordulnak elő a fázistér-szempontból kedvezőtlen 3 részecskés végállapot miatt. A $|\Delta\vec{T}|=\frac{1}{2}$ szabály izotóp-térbeli végállapotként a K^+ bomlásokra $T=1$ -et, a K_2^0 bomlásokra $T=0, 1$ -et enged meg. Mint ahogy a Dalitz-diagramm szerint a végállapot olyan, hogy a részecskék relatív impulzusmomentuma közel nulla, Bose-statisztika miatt a K_2^0 bomlásokra is a $T=1$ végállapot valósul meg [10].

Hogy a bomlási arányokat megkapjuk, felírjuk a folyamatok S -mátrixát. Legyen ξ $T=\frac{1}{2}$, $T_3=\frac{1}{2}$ spurion [10]:

$$S(K \rightarrow 3\pi) = \int d^4x_1 d^4x_2 d^4x_3 f(x; x_1, x_2, x_3) \xi^+ \vec{\tau} K(x) \vec{\pi}(x_1) (\vec{\pi}(x_2) \cdot \vec{\pi}(x_3)) \quad (7)$$

Itt $f(x; x_1, x_2, x_3)$ a pionkoordinátákban szimmetrikus függvény. (7)-ből, az azonos

részecskéket tartalmazó végállapotok szimmetrizálási faktorát is a mátrixelemekbe értve a következő arányokat kapjuk a mátrixelemekre:

$$\langle \pi^+ \pi^+ \pi^- | K^+ \rangle : \langle \pi^0 \pi^0 \pi^+ | K^+ \rangle = 2$$

$$\langle \pi^+ \pi^- \pi^0 | K_2^0 \rangle : \langle \pi^0 \pi^0 \pi^0 | K_2^0 \rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}$$

$$\langle \pi^0 \pi^0 \pi^+ | K^+ \rangle : \langle \pi^+ \pi^0 \pi^- | K_2^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

A fázisterek viszonya [11] csak a töltött és semleges π mezonok tömegkülönbsége miatt különbözik egytől:

$$R(3\pi^0) : R(\pi^+ \pi^0 \pi^-) = 1,1, \quad R(\pi^0 \pi^0 \pi^+) : R(\pi^+ \pi^- \pi^0) = 1$$

$$R(\pi^0 \pi^0 \pi^+) : R(\pi^+ \pi^+ \pi^-) = 1,24$$

Az adódó bomlási arányok a kísérleti adatokkal összevetve:

$$\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^+ \pi^-) : \Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^+) = 3,26_{\text{th}} \sim 3,29_{\text{exp}}$$

$$\Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^-) : \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0) = 0,61_{\text{th}} \sim 0,55_{\text{exp}}$$

$$\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^+) : \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^-) = \frac{1}{2}_{\text{th}} \sim 0,56_{\text{exp}}$$

Kevésbé jó az egyezés a következő esetben:

$$\Gamma(K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^+ \pi^-) : \Gamma(K_2^0 \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^-) = 3,2_{\text{th}} \sim 1,88_{\text{exp}}$$

II. Elektromágneses bomlások

A pszeudoskalár mezonok között a π^0 és η csak elektromágnesen bomlik, az X és a vektormezonok többsége pedig számottevő hányadban bomlik elektromágnesesen. Az elektromágneses kölcsönhatás Hamilton-operátorát ismerjük: $H_{em} = e j_\mu A^\mu$, ahol $e j_\mu = e j_\mu^l + e \left(j_\mu^3 + \frac{1}{\sqrt{3}} j_\mu^8 \right)$ az elektronok, illetve müonok és a hadronok elektromos árama. A hadron-rész két tagjában a 3 és 8 index az SU(3) transzformációs tulajdonságra utal.

Bár a kölcsönhatási Hamilton-operátor a kezünkben van, a bomlások konkrét számolása nehézségekkel jár. A legtöbb esetben a bomló részecske semleges, tehát nyilvánvalóan nem közvetlenül hat kölcsön az elektromágneses térrel. A közvetítő töltött részecskék erős kölcsönhatása így — legalább egy szabad paraméter formájában — explicite is meg kell, hogy jelenjen a mátrixelemekben.

A következőkben az egyes bomlásokat aszerint csoportosítva tekintjük át, hogy H_{em} -ben hányadrendű legalacsonyabb közelítés írja le őket.

1. Elsőrendű folyamatok

$$a) \quad \varrho \rightarrow \pi\gamma < 2\% \quad \omega \rightarrow \pi^0\gamma (10,6 \pm 1)\% \quad \varphi \rightarrow \pi^0\gamma \quad \text{nincs mérés}$$

$$(\eta \rightarrow \varrho_{\text{virt}}\gamma) \quad \omega \rightarrow \eta\gamma < 1,7\% \quad \varphi \rightarrow \eta\gamma < 12\%.$$

A bomlási arányok megállapításához ez esetben az $\omega - \varphi$ keveredés miatt SU(6) technikát kell használnunk. Az elektromos áram SU(3) transzformációs tulajdonságainak legkézenfekvőbb általánosításaként [12] azt mondjuk, hogy SU(6) szempontból a 35-pletbe tartozik, SU(3) \times SU(2) szempontból egy (8, 1) és egy (8, 3) típusú tag összege. A mezonokat a következő módon osztjuk be a 35-be [12]:

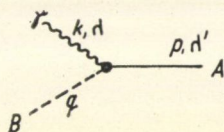
$$\varphi_{j\beta}^{iz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\delta_j^i P_\beta^z + \sigma_j^i \left\{ V_\beta^z + \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_\beta^z V_0 \right\} \right] \quad (8)$$

ahol $i, j = 1, 2, \alpha, \beta = 1, 2, 3$ és $P_\beta^z, V_\beta^z, V_0$ a pszeudoskálár és vektormezon oktett illetve szingulett.

A $35 \otimes 35$ direkt szorzatból a szimmetrikus 35 irreducibilis részt véve (Bose statisztika!) az áram mondott transzformációs tulajdonságát és (8)-at felhasználva a mátrixelemek viszonyára a következő eredmények adódnak:

$$\begin{aligned} \langle \varrho^0 | \pi^0 \gamma \rangle : \langle \varrho^0 | \eta \gamma \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} & \langle \varrho^0 | \pi^0 \gamma \rangle : \langle \omega | \pi^0 \gamma \rangle &= \frac{1}{3} \\ \langle \omega | \pi^0 \gamma \rangle : \langle \omega | \eta \gamma \rangle &= 3 \sqrt{3} & \langle \varrho^0 | \pi^0 \gamma \rangle : \langle \varphi | \eta \gamma \rangle &= \sqrt{\frac{3}{8}} \\ \langle \varphi | \pi^0 \gamma \rangle : \langle \varphi | \eta \gamma \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Egy A vektormezon B pszeudoskálár mezonra és γ -ra való bomlásának az S -mátrix-eleme:



$$S(A \rightarrow B\gamma) = -i \frac{e g_{AB\gamma}}{2m_\pi} (2\pi)^4 \delta^4(k+q-p) \frac{\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^\mu(k, \gamma) k^\alpha \varepsilon^\nu(p, \lambda) p^\beta}{\sqrt{2}(2\pi)^3 p_0 \cdot 2(2\pi)^3 q_0 \cdot 2(2\pi)^3 k_0} \quad (10)$$

Itt ε^μ és ω^μ a foton, illetve vektormezon polarizációs vektorai. A $g_{AB\lambda}$ dimenziótlan paraméter a $\langle B | j_\mu^3 + \frac{1}{\sqrt{3}} j_\mu^8 | A \rangle$ mátrixelemből jött, ez veszi figyelembe az erős kölcsönhatásokat. A (10)-ből adódó bomlási valószínűség:

$$\Gamma(A \rightarrow B\gamma) = \frac{e^2}{4\pi} \cdot \frac{g_{AB\gamma}^2}{4\pi} \frac{\pi}{24} m_A \left(\frac{m_A}{m_\pi} \right)^2 \left(1 - \frac{m_B^2}{m_A^2} \right)^3 \quad (11)$$

Az $\omega \rightarrow \pi^0 \gamma$ bomlásra $\Gamma(\omega \rightarrow \pi^0 \gamma) = 1,27_{\text{exp}}$, ebből

$$\frac{g_{\omega\pi^0\gamma}^2}{4\pi} = 0,05 \quad (12)$$

(9) és (11) alapján összehasonlítva a felsorolt bomlásokat:

$$\frac{\Gamma(\omega \rightarrow \eta \gamma)}{\Gamma(\omega \rightarrow \pi^0 \gamma)} = \frac{1}{27} \left(\frac{m_\omega^2 - m_\mu^2}{m_\omega^2 - m_{\pi^0}^2} \right)^3 = 0,004 < 0,16_{\text{exp}}$$

$$\frac{\Gamma(\rho^0 \rightarrow \pi^0 \gamma)}{\Gamma(\omega \rightarrow \pi^0 \gamma)} = \frac{1}{9} \left(\frac{m_\omega}{m_\rho} \right)^3 \left(\frac{m_\rho^2 - m_\pi^2}{m_\omega^2 - m_\pi^2} \right)^3 = 0,09 < 1,95_{\text{exp}}$$

$$\frac{\Gamma(\phi \rightarrow \eta \gamma)}{\Gamma(\omega \rightarrow \pi^0 \gamma)} = \frac{8}{27} \left(\frac{m_\omega}{m_\phi} \right)^3 \left(\frac{m_\phi^2 - m_\eta^2}{m_\omega^2 - m_\pi^2} \right)^3 = 0,25 < 0,31_{\text{exp}}$$

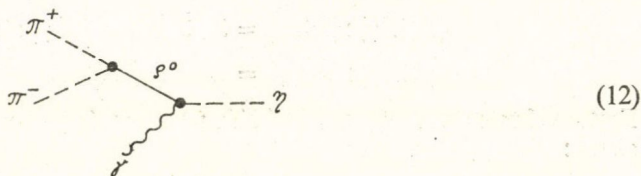
Az egyelőre csak felső határokat megszabó kísérleti eredményekkel láthatóan nincs ellentmondás. (9) alapján nem meglepő az sem, hogy a $\phi \rightarrow \pi^0 \gamma$ bomlásra vonatkozóan hiányoznak a kísérleti adatok.

b) Elsőrendű elektromágneses folyamatként tárgyalhatók a következő bomlások is:

$$\eta \rightarrow \pi^+ \pi^- \gamma \quad (5,5 \pm 1,2) \% \quad \omega \rightarrow \pi^+ \pi^- \gamma < 5 \%$$

$$X \rightarrow \pi^+ \pi^- \gamma \quad (24 \pm 4) \%.$$

Mindhárom bomlást 2π -re bomló közbenső ρ mezon keletkezésével képzeljük el. Pl. az η bomlására:



Az erős kölcsönhatással végbemenő $\rho \rightarrow 2\pi$ bomlás csatolási állandója a kísérletből (lásd az erős bomlások tárgyalásánál): $g_{\rho\pi\pi}^2/4\pi \approx 2,5$. (9) szerint $g_{\rho\eta\gamma} = \frac{1}{\sqrt{3}} g_{\omega\pi\gamma}$

vagyis a (12) gráf kifejezésében nincs szabad paraméter, a $\Gamma(\eta \rightarrow \gamma \pi^+ \pi^-)$ szélesség kiszámolható: $\Gamma(\eta \rightarrow \gamma \pi^+ \pi^-) = 426 \text{ eV}$ adódik, ebből $\Gamma(\eta) = 7,7 \text{ keV} < 10_{\text{exp}} \text{ MeV}$.

Az X és ω bomlására hasonló becslést nem tudunk elvégezni, mert mindkettőnél új, máshonnan nem ismert paraméter lép fel. (X SU(6) szingulett, $\omega \rightarrow \rho \gamma$ esetén pedig $35 \otimes 35$ -ből az antiszimmetrikus 35 kellene.)

2. Másodrendű folyamatok

$$\text{a) } \pi^0 \rightarrow 2\gamma \quad 98,8 \% \quad \eta \rightarrow 2\gamma \quad (38,6 \pm 2,7) \%$$

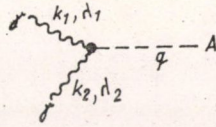
H_{em}^2 -ből az ezen két bomlást leíró rész:

$$H_{\text{int}} = \frac{2}{\sqrt{15}} e^2 A^\mu A^\nu \left(L_3 + \frac{1}{\sqrt{3}} L_8 \right)_{\mu\nu} \quad (13)$$

Itt már nincs szükségünk SU(6)-ra; L_3 és L_8 a $\left(j_\mu^3 + \frac{1}{\sqrt{3}} j_\mu^8 \right) \left(j_\nu^3 + \frac{1}{\sqrt{3}} j_\nu^8 \right)$ kiredukálása után kapott oktet-komponensek.

$$(13)\text{-ből: } \langle \gamma\gamma | \eta \rangle : \langle \gamma\gamma | \pi^0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

Jelentse A π^0 vagy η -t:



$$S(A \rightarrow 2\gamma) = \frac{e^2 g}{2m_\pi} (2\pi)^4 \delta^4(k_1 + k_2 - q) \frac{\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^\mu(k_1, \lambda_1) k_1^\alpha \varepsilon^\nu(k_2, \lambda_2) k_2^\beta}{(2(2\pi)^3)^{3/2} \sqrt{k_1^0 k_2^0 q^0}} \quad (14)$$

Illetve
$$\Gamma(A \rightarrow 2\gamma) = \frac{e^4 g^2}{16\pi m_\pi^2} m_A^3$$

A mátrixelemek arányából és (14)-ből ismét kiszámítható η szélessége: $\Gamma(\eta) = 0,2$ keV adódik, ami majdnem 40-szer kisebb, mint amit korábban kaptunk.

b)

$$\begin{aligned} \omega \rightarrow e^+ e^- & 0,01\% & \varphi \rightarrow e^+ e^- & < 0,4\% & \varrho^0 \rightarrow e^+ e^- & \approx 6,5 \cdot 10^{-3}\% \\ \omega \rightarrow \mu^+ \mu^- & < 0,1\% & \varphi \rightarrow \mu^+ \mu^- & < 0,5\%. \end{aligned}$$

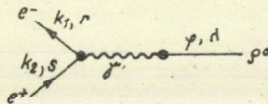
H_{em}^2 most nem zérus mátrixelemet adó része:

$$H_{int} = 2e^2 A^\mu A^\nu j_\mu^l \left(j_\nu^3 + \frac{1}{\sqrt{3}} j_\nu^8 \right)$$

A $8 \otimes 8$ szorzatból a szingulettet kiredukálva adódik, hogy

$$\langle e^+ e^- | \varrho^0 \rangle : \langle e^+ e^- | \omega \rangle : \langle e^+ e^- | \varphi \rangle = 1 : \frac{1}{3} : \frac{\sqrt{2}}{3}$$

Az S -mátrixelem



$$S = (2\pi)^4 \delta^4(p - k_1 - k_2) \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{m}{\sqrt{k_1^0 \cdot k_2^0}} \frac{e^2 f m_\pi}{\sqrt{2} (2\pi)^3 p_0} \bar{u}^r(k_1) \gamma_\mu v^s(k_2) \frac{g^{\mu\nu}}{p^2} \varepsilon_\nu(p, \lambda)$$

Itt f ismét dimenziótlan paraméter, m az elektrontömeg. A $\varrho^0 \rightarrow e^+ e^-$ bomlásra:

$$\Gamma(\varrho^0 \rightarrow e^+ e^-) = \frac{e^4 f^2}{12\pi} \left(\frac{m_\mu}{M_\varrho} \right)^4 M_\varrho \left(1 + 2 \frac{m^2}{M_\varrho^2} \right) \left(1 - 4 \frac{m^2}{M_\varrho^2} \right)^{1/2} \approx 6,5 M_\varrho \cdot 10^{-5} \text{ exp}$$

Ebből $f^2/4\pi = 24$. Ez a csatolási állandó azért érdekes, mert a $\gamma \bullet \varrho$ vertexet $\gamma \bullet \pi^+ \pi^-$ -ből származtatva f és $g_{\varrho\pi\pi}$ között kapcsolatot lehet teremteni [19].

Meg tudjuk becsülni az $\omega \rightarrow e^+e^-$ és $\varphi \rightarrow e^+e^-$ bomlási arányait:

$$\begin{aligned}\frac{\Gamma(\omega \rightarrow e^+e^-)}{\Gamma(\omega)} &= \frac{\Gamma(\omega \rightarrow e^+e^-)}{\Gamma(\varrho^0 \rightarrow e^+e^-)} \cdot \frac{\Gamma(\varrho^0 \rightarrow e^+e^-)}{\Gamma(\varrho^0)} \cdot \frac{\Gamma(\varrho^0)}{\Gamma(\omega)} = \\ &= \frac{1}{9} \left(\frac{M_\varphi}{M_\omega} \right)^3 \cdot 6,5 \cdot 10^{-3} \% \cdot \frac{124}{12} \approx 0,008 \% \\ \frac{\Gamma(\varphi \rightarrow e^+e^-)}{\Gamma(\varphi)} &= \frac{2}{9} \left(\frac{M_\varphi}{M_\varphi} \right)^3 \cdot 6,5 \cdot 10^{-3} \% \cdot \frac{124}{3,3} = 2,3 \cdot 10^{-3} \%\end{aligned}$$

A kísérlettel való egyezés meglepően jó.

Az eddig tárgyalt első-, illetve másodrendű folyamatok közé kellene sorolnunk a $K^\pm \rightarrow \pi^\pm \pi^0 \gamma$, $K^\pm \rightarrow \pi^\pm e^+ e^-$, $K^\pm \rightarrow \pi^\pm \mu^+ \mu^-$ bomlásokat is. Igen kis hányadban fordulnak elő, ami összhangban áll azzal, hogy $\Delta S \neq 0$ miatt az elektromágneses folyamat mellett egy gyenge bomlást is fel kell tételeznünk.

c.) $\eta \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0$ (25,0 ± 1,6) % $\eta \rightarrow 3\pi^0, \pi^0 2\gamma$ (30,8 ± 2,3) %

Mint hogy ezekben a folyamatokban a G -paritás nem marad meg, a C -invarianciát feltételezve másodrendű elektromágneses bomlásokkal van dolgunk. Ezt alátámasztja az is, hogy az $\eta \rightarrow 2\gamma$ és az $\eta \rightarrow 3\pi$ bomlások gyakorisága azonos nagyságrendű. A Dalitz-diagramm is azt mutatja, hogy jogos az I sértés, $I=1$ izotóp spinű végállapot feltételezése: a Dalitz-diagram pontjainak sűrűsége nagyjából állandó. (A végállapot kölcsönhatást elhanyagoljuk.)

Nem relativisztikusan számolva a kör R sugara:

$$3R = \varepsilon_+ + \varepsilon_- + \varepsilon_0 = m_\eta - 3m_\pi$$

$$R = \frac{1}{3} (m_\eta - 3m_\pi)$$

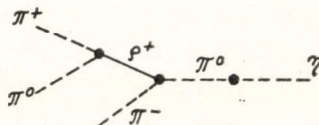
A mátrixelemet konstansnak véve:

$$\Gamma(\eta \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^-) = \frac{a^2}{4\pi m_\eta} \left(\frac{1}{3} m_\eta - m_\pi \right)^2$$

A $K^0 \rightarrow 3\pi$ bomlásokra vonatkozó eredményeink alapján:

$$\frac{\Gamma(\eta \rightarrow \pi^+ \pi^0 \pi^-)}{\Gamma(\eta \rightarrow \pi^0 \pi^0 \pi^0)} = \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{1,1} \approx 0,6$$

Megemlítjük, hogy



bomlási sémát elképzelve az $\eta \rightarrow \pi^0$ rejtett elektromágneses átmenet kvarkmodellben számolható, egyelőre nem túl jó kvantitatív eredménnyel [13].

3. Harmadrendű folyamatok

A mérések eddig egyetlen ilyen folyamatról tanúskodnak:

$$\pi^0 \rightarrow \gamma e^+ e^- \quad (1,19 \pm 0,5) \%$$

Az előzőkhöz képest semmilyen új problémát nem okoz. Gyakorisága a várakozásnak megfelelően kb. 2 nagyságrenddel kisebb, mint a $\pi^0 \rightarrow \gamma\gamma$ bomlása.

III. Erős bomlások

Valamennyi vektormezon elsősorban erős kölcsönhatással bomlik. Egységes képbe foglalásuk több nehézséggel jár: az $\omega - \varphi$ keveredés miatt a mátrixelemek összehasonlításához az SU(3)-on túlmenő információra van szükségünk. A sztatikus SU(6) viszont nem használható, mert nyilvánvalóan megtiltja a megfigyelt bomlások többségét: legkirívóbb eset az, hogy a gyakorlatilag 100%-os aránnyal történő $\varrho \rightarrow \pi\pi$ bomlásokat sem engedi meg. Tekintve, hogy két részecske bomlásokról van szó, az SU(6)_w a fizikailag legkézenfekvőbb szimmetria, amit alkalmazhatunk. Így a $\varphi \rightarrow \varrho\pi$ bomlásoktól eltekintve valóban elfogadható eredményeket kapunk.

SU(6)_w-ben a mezon 35 felépítése a következő:

$$\varphi_{j\beta}^{iz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\delta_j^i S_\beta^\alpha + \sigma_j^i \left\{ \underline{W}_\beta^\alpha + \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_\beta^\alpha \underline{W}_0 \right\} \right] \quad (15)$$

ahol (8) jelöléseivel összevetve $S_\beta^\alpha = V_{0\beta}^\alpha$, $\underline{W} = (V_{+1}, P, V_{-1})$, vagyis (8)-hoz képest a nulla helicitású vektormezonok és a pszeudoskalár mezonok helyett cseréltek ($\underline{W} - S$ flip [14]).

$$1. \quad \varrho \rightarrow \pi\pi \quad 100\% \quad \varphi \rightarrow K^+ K^- \quad (30 \pm 3)\%$$

$$K^* \rightarrow K\pi \approx 100\% \quad \varphi \rightarrow K_1^0 K_2^0 \quad (38 \pm 3)\%.$$

Ha a kölcsönhatási Hamilton-operátort $H_{\text{int}} \sim (P \partial_\mu P - \partial_\mu P \cdot P) V^\mu$ alakban tételezzük fel, egy A vektormezon B, C pszeudoskalár mezonokra való bomlására:

$$S(A \rightarrow B + C) = -g_{ABC} (2\pi)^4 \delta^4(p_A - p_B - p_C) \frac{\varepsilon^\mu(p_A \lambda)}{[2(2\pi)^3]^{3/2}} \cdot \frac{(p_B - p_C)_\mu}{\sqrt{p_A^0 p_B^0 p_C^0}}$$

Ebből

$$\Gamma(A \rightarrow B + C) = \frac{1}{12} \frac{g_{ABC}^2}{4\pi} M_A \left[\left(1 + \frac{M_B^2 - M_C^2}{M_A^2} \right)^2 - 4 \frac{M_B^2}{M_A^2} \right]^{3/2} \quad (16)$$

A bomlási arányok megállapításához a $35 \otimes 35 \otimes 35$ szorzatból skalárt kell kiredukálnunk úgy, hogy $35 \otimes 35$ -ből antiszimmetrikus 35-öt választunk ki. Így (15) alapján kapjuk, hogy

$$\langle \pi\pi | \varrho \rangle : \langle K^+ K^- | K^{*0} \rangle : \langle K^0 \pi^0 | K^{*0} \rangle : \langle K^+ K^- | \varphi \rangle : \langle K^0 \bar{K}^0 | \varphi \rangle = \sqrt{2} : 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : 1 : 1$$

$$\langle K^0 \pi^+ | K^{*+} \rangle : \langle K^+ \pi^0 | K^{*+} \rangle : \langle K^0 \pi^0 | K^{*0} \rangle = 1 : \frac{1}{\sqrt{2}} : 1$$

$$\langle \pi\pi | \Phi \rangle = \langle \pi\pi | \omega \rangle = 0$$

(16)-ból a $\Gamma(\varrho \rightarrow \pi\pi) \approx \Gamma(\varrho) = 124$ MeV kísérleti adat felhasználásával a már korábban is említett $g_{\varrho\pi\pi}$ csatolási állandó:

$$g_{\varrho\pi\pi}^2/4\pi = 2,5.$$

A többi bomlásra ezt felhasználva adódik:

$$\Gamma(K^{*+} \rightarrow \pi K) = \Gamma(K^{*+} \rightarrow \pi^+ K^0) + \Gamma(K^{*+} \rightarrow K^+ \pi^0) = 45 \text{ MeV} \sim 49_{\text{exp}} \text{ MeV}$$

$$\Gamma(\varphi \rightarrow K^+ K^-) = 2,4 \text{ MeV} \sim 1_{\text{exp}} \text{ MeV}$$

$$\Gamma(\varphi \rightarrow K_1^0 K_2^0) = 0,8 \text{ MeV} \sim 1,3_{\text{exp}} \text{ MeV}.$$

Az egyezés láthatóan csak a K^* bomlásokra jó. A várakozásnak megfelel, hogy az $\omega \rightarrow \pi\pi$ mátrixelem nulla: ez izotópspin invarianciát sértene. A táblázatokban mégis említett $\omega \rightarrow 2\pi$ bomlást elektromágneses eredetűnek tartják, és $\omega - \varrho^0$ keveredéssel magyarázzák [15].

2.

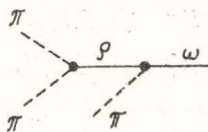
$$\varphi \rightarrow \pi\varrho \quad (32 \pm 8)\%$$

$$\omega \rightarrow \pi\varrho_{\text{oirt}} \rightarrow 3\pi \quad 88\%$$

$$K^* \rightarrow K\varrho_{\text{oirt}} \rightarrow K\pi\pi < 0,2\%.$$

A három pszeudoskalár mezont tartalmazó végállapotot mindegyik esetben úgy képzeljük el, hogy közbenső ϱ mezon bomlott 2π -re:

pl.



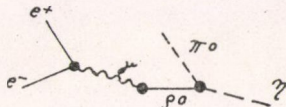
Bár ez a feltevés tetszetős, a gyakorlatban nem működik, mivel a $\varphi \rightarrow \pi\varrho$ bomlást mind a sztatikus $SU(6)$, mind az $SU(6)_w$ megtiltja. A probléma egy lehetségesnek látszó megoldása az, hogy a természetben nem az általunk használt ideális $\omega - \varphi$ keverési arány valósul meg. Ilyen elképzelés alapján Gerstein $\Gamma(\varphi \rightarrow \varrho\pi) \approx 0,1 - 0,3$ MeV-et kapott [16], nem tesz azonban említést arról, hogy ez mennyiben van összhangban az ω -ra vonatkozó adatokkal.

Az erős kölcsönhatással végbe menő folyamatok között említjük az $X \rightarrow \eta\pi\pi$ bomlást. Ezt elvileg le tudnánk írni egy a mezonterekre szokásos $H_{\text{int}} = \lambda\varphi^4$ típusú kölcsönhatás feltételezésével, de nem világos, hogy az elektromágneses $X \rightarrow \pi\pi\gamma$ folyamat miért szerepel mellette olyan lényeges hányadban.

IV. C-sértő bomlások

A hosszú élettartamú K_S^0 CP-sértő bomlásának felfedezése után terjedt el az a hipotézis, hogy a természetben létezik C sértő, P őrző kölcsönhatás. A hipotézis ellenőrzésére javasolt bomlásokat [17] nem soroljuk fel, csupán két alaposabban vizsgált esetre hívjuk fel a figyelmet.

Az egyik az $\eta \rightarrow \pi^0 e^+ e^-$ [1] szerint az előfordulási aránya $< (1,1 \pm 1,1)\%$, tehát nem biztosan létező folyamat. Leírását a következő diagramm adhatná:



Ismeretlen csak a C-sértő $\eta \rightarrow \pi^0$ bomlást előidéző kölcsönhatás csatolási állandója.

Másik példaként az $\eta \rightarrow 3\pi$ bomlást említjük. Korábban a G-sértést C őrző, I sértő folyamatnak tulajdonítottuk. Elképzelhető azonban, hogy ehhez a másodrendű elektromágneses folyamathoz egy C sértő I őrző kölcsönhatás is ad járulékot, amely még az új kölcsönhatás kis csatolási állandója esetén is megfigyelhető lehet [18]. Valóban, $I=0$ esetén a bomlási mátrixelem a mezon impulzusokban antiszimmetrikus, így a Dalitz-diagram a tiszta $I=1$ végállapottal szemben nem lehet egyenletes kitöltésű. A kísérleti adatok azonban ebben az esetben sem mutatnak egyértelműen a C-sértő kölcsönhatás létezésére.

A mezonbomlások áttekintése után kialakult képünk alapján azt mondhatjuk, hogy a helyzet a legjobbnak a leptonos gyenge bomlások és az elektromágneses folyamatok körében mondható.

Egyáltalán nem világos a nem leptonos gyenge bomlások mechanizmusa. Problémák lépnek fel, mielőtt lényeges szerephez jutnak az erős kölcsönhatások: ezt láttuk az elektromágneses bomlásoknál is (pl. $\Gamma(\eta)$ problémája), de különösen az erős bomlásoknál. Az unitér szimmetriákat illetően azt mondhatjuk, hogy következményeit tekintve az SU(3) a legsikeresebb. Az SU(6) szimmetria, noha az SU(3) bizonyos korlátjait el tudja hárítani, a kölcsönhatási folyamatok vizsgálatánál komoly nehézségekhez vezet. Több jel mutat arra, hogy az SU(3) szimmetria nem spontán sérül, hanem egy középérős, nem SU(3) szimmetrikus kölcsönhatás létezik, továbbá, hogy fel kell tételeznünk CP-t vagy C-t sértő kölcsönhatás létezését.

Köszönetünket kell kifejeznünk Frenkel Andor és Surányi Péter tudományos munkatársaknak sok segítségükért.

IRODALOM

- [1] A. H. Rosenfeld et al. UCRL-8030 August, 1965.
- [2] K. Bardacki et al., Phys. Rev. Lett. 13, 698, 1964; 14, 48, 1965.
- [3] N. Cabibbo, Phys. Rev. Lett. 10, 531, 1963.
- [4] S. Schweber: An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, New York, 1961.
- [5] Goldberger, Treiman, Phys. Rev. 110, 1178, 1958.
- [6] J. J. de Swart, Rev. Mod. Phys. 35, 916, 1963.
- [7] M. Gell-Mann, Phys. Rev. Lett. 12, 155, 1964.
- [8] R. H. Dalitz: Properties of the Weak Interactions, Dubnai cikkgyűjtemény.
- [9] N. Cabibbo, Phys. Rev. Lett. 12 62, 1964.

- [10] *K. Nishijima*: Fundamental Particles, 1964, New-York.
- [11] *G. Källén*: Elementary Particle Physics, 1964, Reading, USA.
- [12] *B. Sakita*, Phys. Rev. *136 B*, 1756, 1964.
- [13] *Kuti Gy.*, személyes közlés.
- [14] *H. J. Lipkin*, S. Meshkov, Phys. Rev. Lett. *14*, 670, 1965.
- [15] *J. Marte*, R. G. Sachs, Phys. Rev. *135B*, 459, 1964.
- [16] *I. S. Gerstein*, Phys. Rev. Lett. *14*, 453, 1965.
- [17] *Marx Gy.*, Phys. Rev. *140B*, 1068, 1965.
- [18] *M. Nauenberg*, Phys. Lett. *17*, 329, 1965.
- [19] *G. Feldman*, P. Matthews, Phys. Rev. *132*, 823, 1963.

IZOTÓPKÉSZÍTMÉNYEK RADIOAKTÍV TISZTASÁGÁNAK VIZSGÁLATA Ge(Li) FÉLVEZETŐ ÉS NaJ(Tl) SZCINTILLÁCIÓS DETEKTOROKKAL*

VERES ÁRPÁD, UCHRIN JÁNOS, BEDROSSZIÁN PÉTER, UCHRIN GYÖRGY

MTA Izotóp Intézet
Elektronikai és Finommechanikai Kutató Intézet

Tizenkét, a gyakorlatban felhasználásra kerülő radioizotóp spektrumát vizsgáltuk meg mind szcintillációs, mind félvezető detektorral. A berendezés felépítése és a mérési körülmények ismertetése után a kapott energia spektrumok alapján diszku-
táljuk az eredményeket.

Bevezetés

Mint ismeretes, a szcintillációs mérés technika elterjedésével viszonylag gyors és egyszerű módszer állt, mind a magspektroszkópiával foglalkozó kutatók, mind a radioizotópokat vizsgálataikban felhasználni kívánó különböző szakterületeken dolgozó szakemberek rendelkezésére.

Összehasonlítva a szcintillációs detektort az előzőleg használt ionizációs kamrá, proporcionális és GM tartományában működő számláló csövekkel a detektor tulajdonságát jól meghatározó felbontása, hatásfok és a lejátszódó folyamatok gyorsasága alapján számos előny szolt a szcintillációs detektorok mellett és ezért rendkívül széles körben terjedt el felhasználásuk. Magspektroszkópiai szempontból az egyes magok nívósémáinak tanulmányozásánál, izotóp tisztasági vizsgálatok esetében pedig az összetett spektrumok szétválasztásánál az energia felbontásnak van lényeges szerepe.

A szcintillációs detektorokkal összehasonlítva a félvezető detektorokat az utóbbiak főleg az energia felbontás és a folyamatok lejátszódásának szempontjából jelentenek előnyt, mivel ezek a tulajdonságok általában 1—2 nagyságrenddel kedvezőbbek a félvezető detektorok esetében. A hatásfokra vonatkozó értékek viszont a szcintillációs kristályok esetében 1, esetleg 2 nagyságrenddel is jobbak, mint a félvezetőké. Ez viszont kisebb problémát jelent napjainkban, mivel mind a reaktorokban, mind a nagyteljesítményű részecske gyorsítóknál az esetek jelentős részében bőségesen áll a vizsgálandó anyagból aktivitás rendelkezésre.

A félvezető detektorok különböző területen való alkalmazásával és tulajdonságainak szcintillátoros detektorokkal való összehasonlításával több nemzetközi szimpóziumon és az irodalomban is foglalkoztak és egyre több közlemény jelenik meg [1—2]. Az eddigi eredmények diszkussziója alapján a következő általánosabb megállapításokat tehetjük:

A spektrum analízis területén a NaJ(Tl) kristállyal 60 KeV a félértékszélesség, ami 6 KeV körüli energiameghatározási pontosságot tesz lehetővé. Ugyanakkor Ge(Li) félvezető detektorral 3 KeV-es félértékszélesség mellett $\pm 0,3$, néha $\pm 0,1$ KeV

* Érkezett 1966. okt. 30.

pontossággal határozhatjuk meg a gamma kvantum energiáját. Ezzel rendkívül jó energia standardokat kaphatunk és elérhetjük azt is, hogy több egymáshoz közel eső energianívó létezését kimutathassuk.

A koincidencia és szögkorrelációs méréseknél, a legelőnyösebbnek azt találták, ha NaJ(Tl)-Ge(Li) koincidencia kapcsolást alkalmaznak, mert így a felbontás ugyan kevésbé javul, de az effektivitás is kevésbé romlik. NaJ(Tl)-NaJ(Tl) koincidencia kapcsolás esetén 2—4 nagyságrenddel jobb az effektivitás, mint a Ge(Li)-Ge(Li) koincidenciánál. Az utóbbi viszont közel 400-szor több információt szolgáltat az energia értékekre és nem nehéz elképzelni olyan helyzetet, hogy néhány esemény jól meghatározott energiákkal jobban értékelhető, mint igen sok esemény nagy energia bizonytalansággal. Ezt alátámasztotta *Blokék* [4] $^{177\text{m}}\text{Lu}$ vizsgálatára vonatkozó munkája, amelyben elsőnek mutatták ki a 413 és 418 KeV mellett a 426 KeV-es $19/2$ spinű gerjesztett állapotot.

Az alacsony energiájú magorientáció, a Mössbauer-spektroszkópia, a konverziós koeficiensek (n, γ) és más típusú magreakciók tanulmányozásának és még más területnek is fontos vizsgálati eszköze lett a félvezető detektor.

Mi az alábbiakban az izotópok gyakorlati felhasználása szempontjából lényeges radioaktív tisztaságvizsgálatok (Ge/Li) félvezető detektorral elért eredményeinkről számolunk be, összehasonlítva azokat a szcintillációs detektorral mért adatokkal.

Kísérleti körülmények leírása

A szcintillációs és félvezető spektrumok felvételét KFKI típusú 256 csatornás tranzisztorizált analizátorral végeztük. A méréshez az egyes sugárzó anyagokból vékony fóliára készítettük el a mintákat arra törekedve, hogy minél kevesebb hordozó anyagot tartalmazzanak az egyes források, főleg a lágyabb sugárzók esetében, hogy az önabszorpciót és a szóródást a minimálisra csökkenthessük. A források általában 5—10 cm távolságra helyezkedtek el a detektorok felületétől. A két detektor lényegesebb paraméterei a következők:

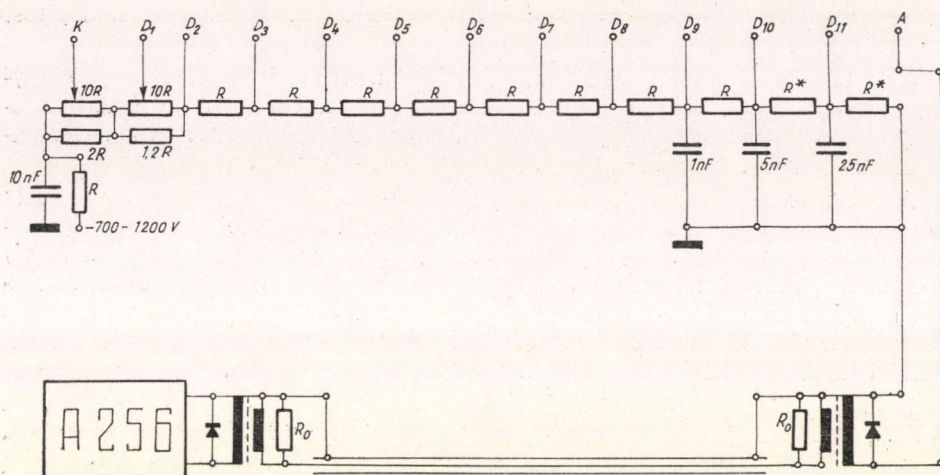
a) *Szcintillációs detektor*

Szcintillációs detektorként a gamma spektrumok felvételéhez szokásos NaJ(Tl) kristályt használtuk. A kristály mérete $\varnothing 32 \times 32$ mm, amely EMI. 6097F típusú fotomultiplier csőhöz csatlakozik. A detektor felbontása 7,5% a ^{137}Cs 661 KeV-es vonalára. A detektor általunk összeállított elrendezésben az 1. ábrán látható. Linearitását 59,6—1,330 KeV-es energia tartományban a két végponttal együtt hét különböző gamma energiával ellenőriztük. Ahogy az a 2. ábrán látható a ^{241}Am , ^{57}Co , ^{22}Na , ^{137}Cs , ^{54}Mn és ^{60}Co kalibráló források irodalmilag elfogadott gamma energiával a detektor igen jó linearitást mutatott.

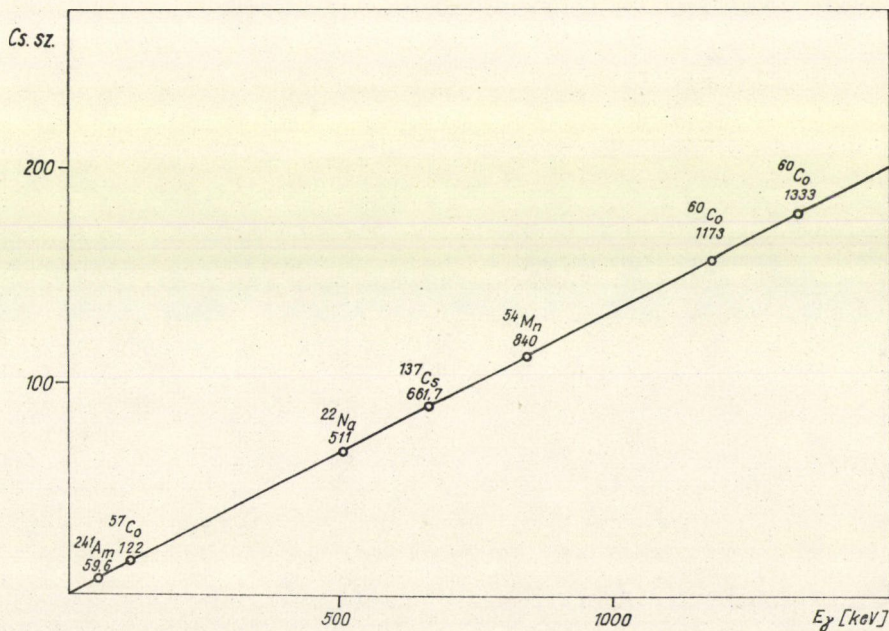
b) *Félvezető detektor*

Minthogy a különböző — abszorpciós folyamatok hatáskeresztmetszete az atom rendszámával, különösen a fotoeffektus esetében a rendszám 4—5 hatványával arányosan változik, célszerűbb a spektrumok felvételére szilícium helyett germánium detektort alkalmazni. 100 KeV-es gamma energia esetében a lineáris fotoabszorpciós koeficiens germániumban 40-szer nagyobb mint szilíciumban.

A Ge detektor készítése a *Pell* által javasolt „litiumdrift” technikával történt. Ebben az esetben a *p*-típusú alapanyagban jelenlevő akceptor szennyezést Li ionokkal kompenzáljuk. Az így készített detektorok felbontása lényegesen jobb, mint más technikával készített félvezető detektoroké. A félvezető kristályra kapcsolt feszült-



1. ábra. A szcintillációs detektor osztólánca és illesztése a 256 csatornás analízátorhoz



2. ábra. A szcintillációs detektor linearitásának ellenőrzése különböző radioizotópok γ -energiáival

séggel létrehozott elektromos tér csak a bejövő sugárzás által keltett lyuk-elektron-párok begyűjtésére szolgál. A kiürített réteg mélysége és kapacitása ezen detektoroknál gyakorlatilag független az alkalmazott feszültségtől, ezt a driftelés mélysége határozza meg. A mérésnél használt Ge(Li) félvezető kristály érzékeny mélysége 3 mm, érzékeny felülete pedig $1,9 \text{ cm}^2$ volt. A kristály egyszerű szorító szerkezetben helyezkedett el, amely mechanikusan rögzítette az elektromos kontaktust biztosító nikkel bevonatú elektródákat.

A kristály visszarámának csökkentése érdekében, a lítium ionok nagy mozgékony-sága miatt, csak igen alacsony folyékony levegő vagy nitrogén hőmérsékleten üzemeltethető. Mi kriosztátba [5] helyezve folyékony nitrogénnel, 77°K -on üzemeltettük. Ekkor 100 V zárófeszültségnél a visszarám $3 \cdot 10^{-9} \text{ A}$ volt.

A jó felbontás egyik szükséges feltétele, hogy az előerősítőt a Ge(Li) kristály kapacitásán kívül minél kisebb kapacitás terhelje. A szerelést ennek figyelembevételével kellett végezni. A kapcsolódó elektronikával szemben szintén követelmény a kicsiny zaj, illetve az 1 pF-ra eső minimális zajnövekedés. A mérésünknel használt előerősítő zaja zérus bemeneti kapacitás esetén 2,4 KeV, míg az 1 pF-ra eső zajnövekedés 0,085 KeV volt. Az előerősítő után egy NE 5389 típusú erősítőn keresztül jutottak a jelek a sokcsatornás analízátor bemenetére.

A Ge(Li) detektorunk félérték szélességére a higany-203 279 KeV-es vonalára 3,8 KeV, a cobalt-60 1333 KeV-es vonalára pedig 5,5 KeV volt a legjobb érték.

A detektor stabilitásának és reprodukáló képességének vizsgálata alapján azt tapasztaltuk, hogy a rendszer instabilitása 24 órás üzemmenet esetében sem haladta meg az 1 KeV-t és 4 hónapos üzemeltetés után sem mutatkozott változás a kalibráló izotóp félérték szélességben és nem lépett fel visszarám növekedés.

Mérési eredmények értékelése

A fent említett mérési elrendezésben szcintillációs és félvezető detektorokkal felvettük számos különböző radioizotóp γ -spektrumát. Az izotópok megválasztásánál egyrészt a felhasználásban megkívánt radioaktív tisztasági követelmények játszottak szerepet, másrészt szeretnénk volna olyan izotópok spektrumait félvezető detektorral megvizsgálni, amelynek a szcintillációs fotocsúcsa esetleg több vonalból tevődik össze. Ezek közül 10 „tiszt” izotóp és egy esetben két izotóp keverékekről felvett spektrumokat mutatjuk be.

Ezek ^{22}Na , ^{51}Cr , ^{57}Co , $^{110\text{m}}\text{Ag}$, ^{133}Ba , ^{137}Cs , ^{192}Ir , ^{198}Au és $^{187}\text{W} + ^{72}\text{Ga}$. Az eredmények jobb értékelhetősége miatt a szcintillációs és félvezető detektorokkal felvett spektrumokat úgy ábrázoltuk, hogy a megfelelő energiájú vonalak fotocsúcsai egymással azonos csatornában helyezkedjenek el. A szcintillációs spektrumok felvétele általában 200 sec-os, míg a félvezetős mérések 0,5–1 órás mérési idővel történtek. Ezalatt a legintenzívebb csúcsok esetében a maximális beütésszámot tartalmazó csatornába mintegy 65 000 impulzust gyűjtöttünk be. Ily módon mind a statisztikus, mind a detektor esetleges túlterheléséből adódó hibát a minimálisra szoríthattuk le. A kisebb intenzitással megjelenő csúcsokat az ábra méretek reális keretek között tartása mellett felszorzással tettük szemléletesebbé. Az egyes csúcsok energiáit — KeV-ben — a csúcsok feletti számok jelzik. A fent említett radioizotópok szcintillációs és félvezetős gamma spektruma a 3–12. ábrán láthatók. Ezen

spektrumokra a mérési eredményeink összehasonlítása alapján még a következő megállapításokat tehetjük:

Natrium-22. A 3. ábrán látható ^{22}Na szcintillációs és félvezetős spektruma egyaránt jól mutatja az irodalmilag is jól ismert 511 és 1280 KeV-os energiájú vonalakat. Ez esetben a félvezető detektor javára a jobb felbontóképesség és ennek alapján a pontosabb energia érték meghatározása az előny.

Krom-51. A 4. ábrán az ugyancsak egyetlen 323 KeV-os gamma energiájú ^{51}Cr izotóp spektrumnál az előzőhöz hasonló a helyzet.

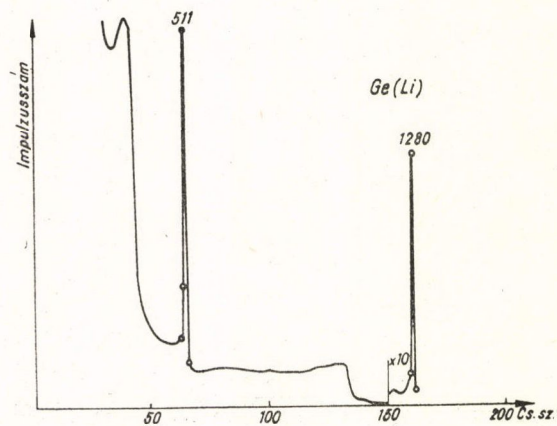
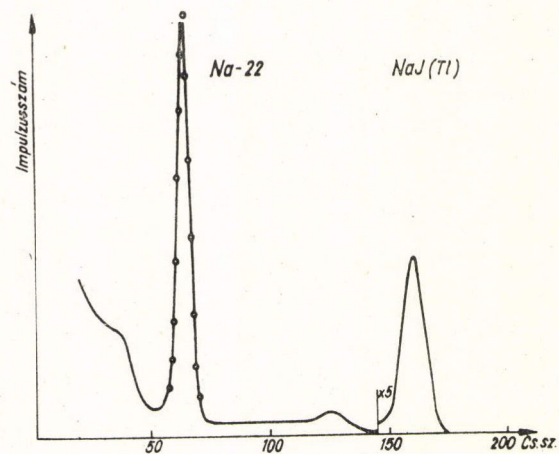
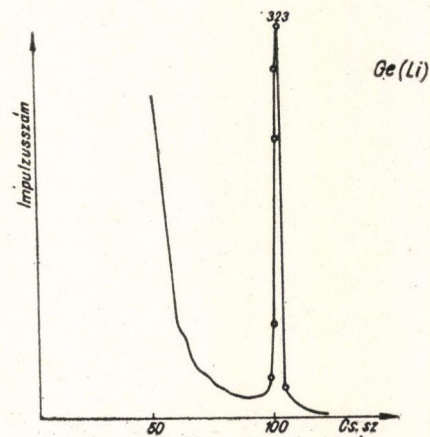
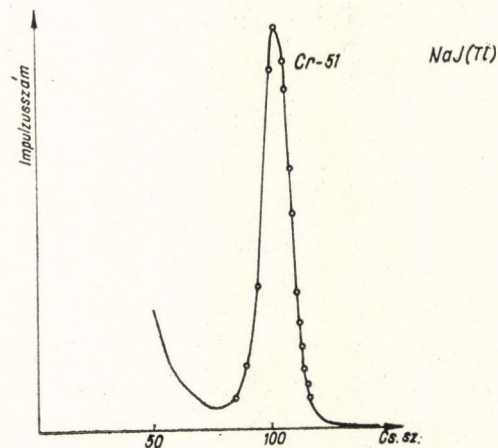
Cobalt-57. Az 5. ábra ^{57}Co szcintillációs és félvezetős spektrumai már jobban eltérnek egymástól, mint az előző két izotóp esetében. A szcintillációs detektorral felvett spektrum leszálló ágának az aszimmetrikus volta az, ami utal még más, a 122 KeV-től eltérő energiájú és kisebb intenzitású komponens jelenlétére. A spektrum felbontás módszerével azonban ebből az aszimmetriából csak igen nagy energia és intenzitás bizonytalansággal határozható meg a jelenlevő komponens. A félvezető spektrumból azonban igen jól meghatározható, mind a 122 és 136 KeV-es energia, mind a két gamma vonal között fennálló 8,8:1 intenzitás arány.

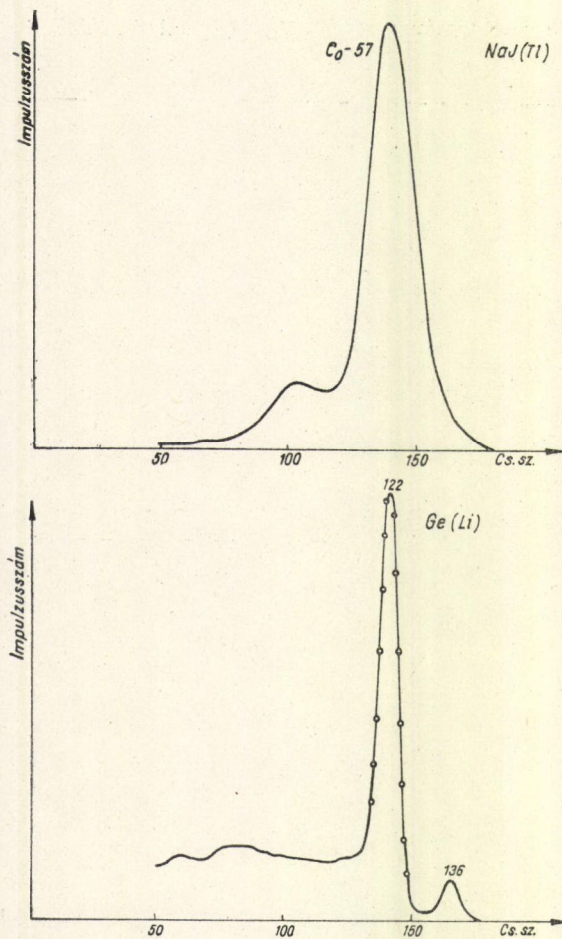
Cobalt-60. A 6. ábrán szereplő ^{60}Co két spektruma közül a félvezető detektor előnye ismét a jó energia felbontás. Ez lehetővé teszi pl. az energiában a ^{60}Co -hoz igen közel eső ^{59}Fe esetleges szennyeződés kimutatását, ami a szcintillációs spektrum felvételével igen nehezen, vagy egyáltalán nem kivitelezhető.

Ezüst-110m. A 7. ábrán az $^{110\text{m}}\text{Ag}$ spektrumjának a legintenzívebb vonalaiból álló rész szcintillációs és félvezetős detektorral felvett spektruma látható. A 660 KeV-es egy bomlására eső 94%-ot kitevő intenzitású csúcs, valamint a 880 KeV-es, 69%-os intenzitású szcintillációs fotocsúcs alatt, a félvezetővel felvett spektrumban igen jól láthatóan még több, kisebb intenzitással megjelenő gamma vonalak vannak, ezek a szcintillációs spektrum szimmetriáját elrontják ugyan, de a spektrum lebontás módszere nem alkalmas a félvezető spektrum alapján kapott energia és intenzitás értékekhez hasonló pontossággal történő meghatározására.

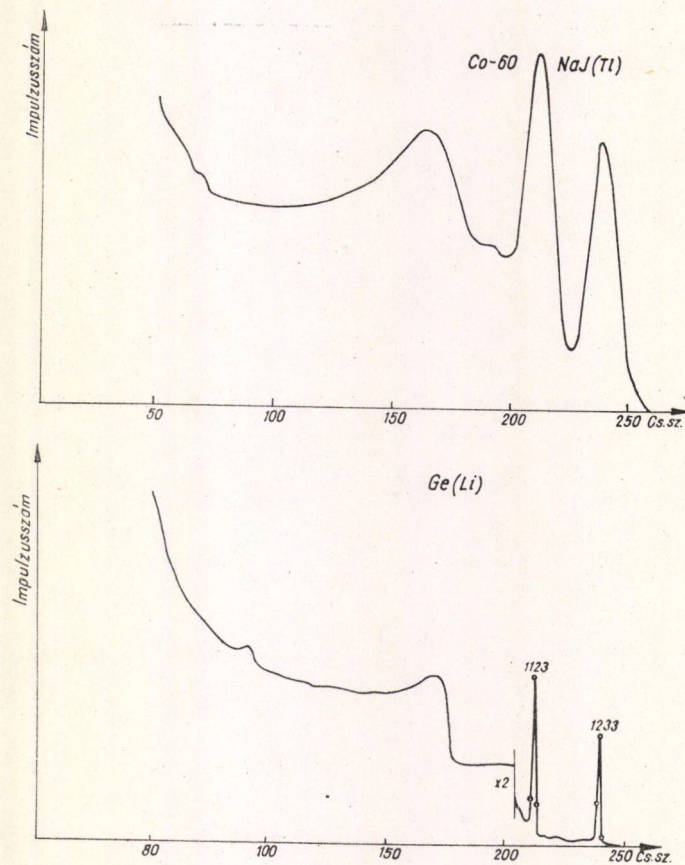
A félvezető detektorral felvett spektrumból jól látszik ugyanis, hogy a 94%-ban jelenlevő 657 KeV-es vonal mellett jelen vannak még a 619, 679, 705 és 764 KeV-es vonalak is, 5, 12, 17 és 21%-ban. A szcintillációs spektrum második csúcsa alatt a 885 KeV-es 69%-os intenzitású vonal mellett jelen van még 8%-ban a 818 KeV-es és 29%-ban a 936 KeV-es csúcs. Ezek az értékek az irodalomban ismert energia és intenzitás adatokkal jó egyezésben vannak. A spektrum 1380, 1480 és 1510 KeV körüli vonalait az analízator alacsony csatornaszáma miatt nem szerepeltethettük, csak más erősítés mellett ellenőriztük az intenzitás és energia értékeiket. Ismeretes ugyanis, hogy pl. egy 256 csatornás analízator esetén 1024 KeV-es γ -sugárzást feltételezve, 4 KeV-es csatornaszélesség adódik. Ez azt jelenti, hogy ilyen feltételek mellett 4 KeV-nél jobb energia meghatározást elérni nem tudunk, hiába adna erre lehetőséget a félvezető detektor. Az 1 KeV-es csatornaszélességhez ilyen energia esetén 1024-es csatorna számú analízatorra lenne szükség. Ha azonban nem a teljes spektrumot vizsgáljuk, akkor egyes kisebb energiájú vonalak az említettől kisebb energia bizonytalansággal is meghatározhatók és elérhető a 0,1–0,5 KeV energia-pontosság is.

Barium-133. A 8. ábrán látható ^{133}Ba szcintillációs és félvezetős detektorokkal felvett spektrumból szintén leolvasható, mint az előző esetekben is, hogy míg az első 82 KeV-es csúcs szcintillációs spektruma is szimmetrikus és nem zavar

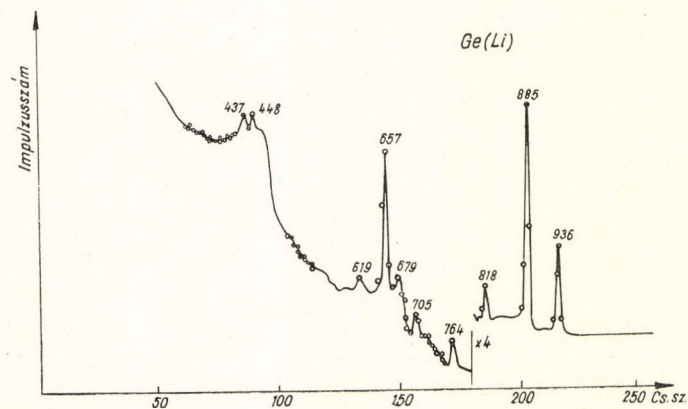
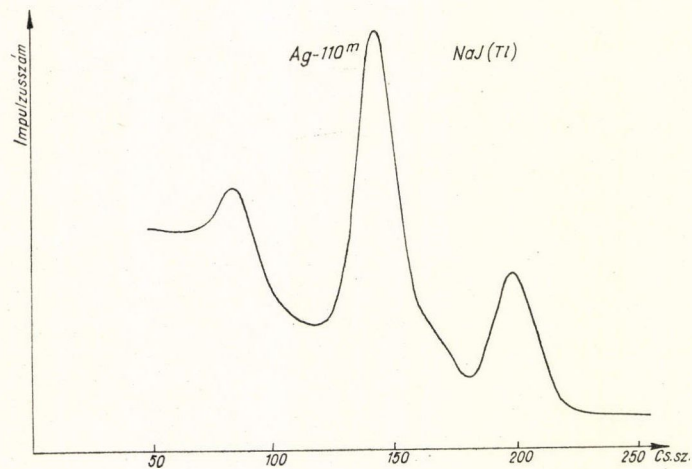
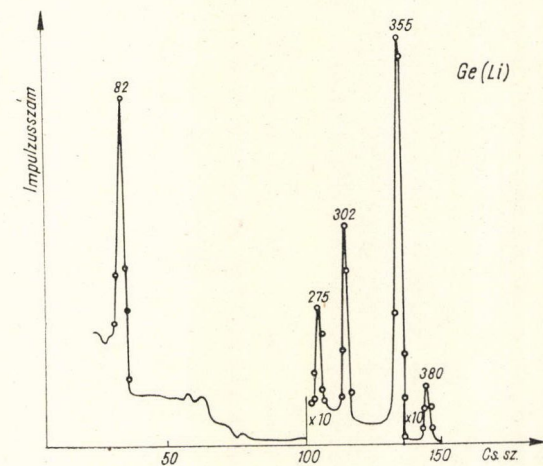
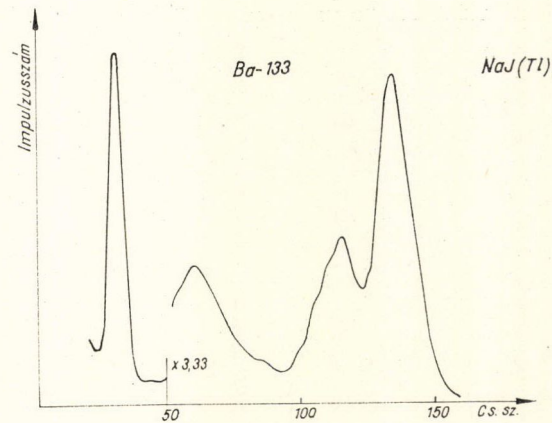
3. ábra. ^{22}Na szcintillációs és félvezetős γ -spektruma4. ábra. ^{51}Cr szcintillációs és félvezetős γ -spektruma



5. ábra. ^{57}Co szcintillációs és félvezetős γ -spektruma



6. ábra. ^{60}Co szcintillációs és félvezetős γ -spektruma

7. ábra. ^{110m}Ag szcintillációs és félvezetős γ -spektruma8. ábra. ^{133}Ba szcintillációs és félvezetős γ -spektruma

az energiában elég távol levő nagyobb csúcsok, addig ez a két nagyobb energiájú csúcsról már nem mondható el. A 302 KeV-es energiát reprezentáló csúcs felszálló ágának asszimmetriája más kisebb intenzitású csúcs jelenlétére utal. A félvezetős spektrumban 275 KeV-es energiával ez valóban meg is jelenik. A 355 csúcs esetében pedig a leszálló ág szimmetriáját rontja el a 380 KeV-es csúcs. A félvezető detektorral mért energia és intenzitás viszonyok az irodalmi értékekkel ez esetben is jó egyezést mutatnak.

Cézium-137. A 9. ábrán feltüntetett ^{137}Cs spektrum, a mérések ellenőrzésénél sokat használt spektrum és csupán az eddig elmondottak újabb bizonyításául vettük fel a bemutatandó spektrumok közé.

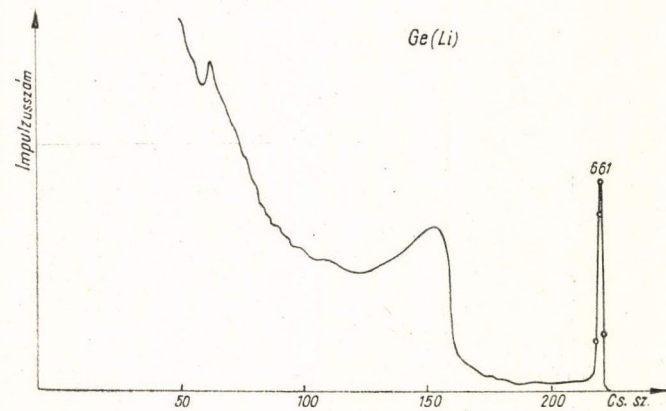
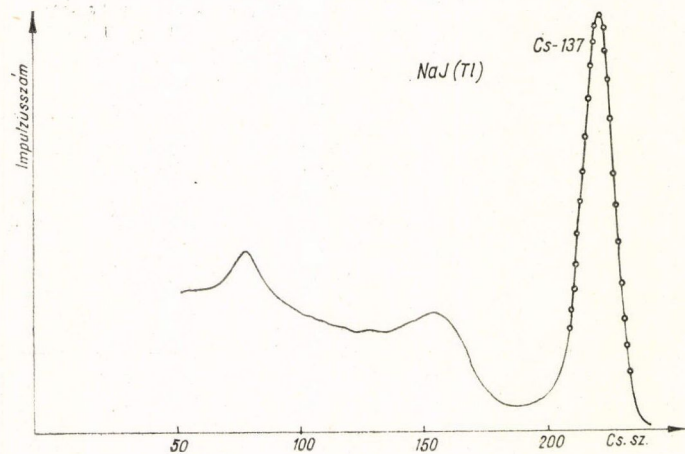
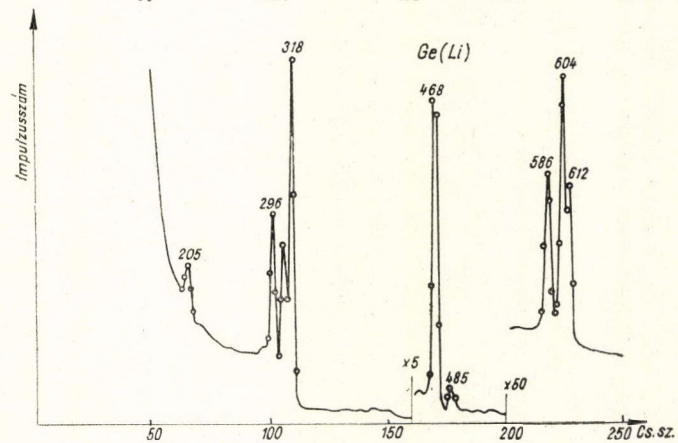
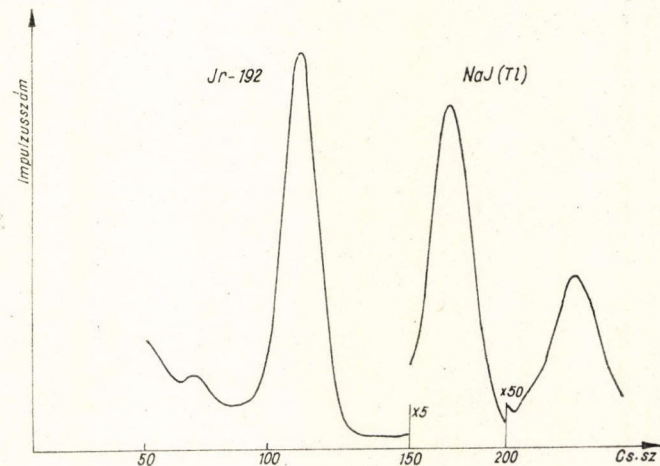
Iridium-192. A 10. ábrán látható ^{192}Ir spektrum első szcintillációs csúcsa három különböző energiájú vonalból tevődik össze, mégpedig a 30%-os intenzitású 296 KeV-es, a 28%-os 309 KeV-es és a 83%-ban jelenlevő 316 KeV-es gamma kvantumokból. A második szcintillációs csúcs leszálló ágának asszimmetriáját a kis intenzitású 485 KeV-en kívül a következő energiájú γ -kvantum szóródása okozza. A harmadik szcintillációs fotocsúcs szintén három, az 586, 604 és 612 KeV-es komponensek összetételéből adódik és emiatt mutat asszimmetriát. Itt, a teljes spektrumnak szintén csak az általunk legérdekesebbnek tartott részét ábráztuk.

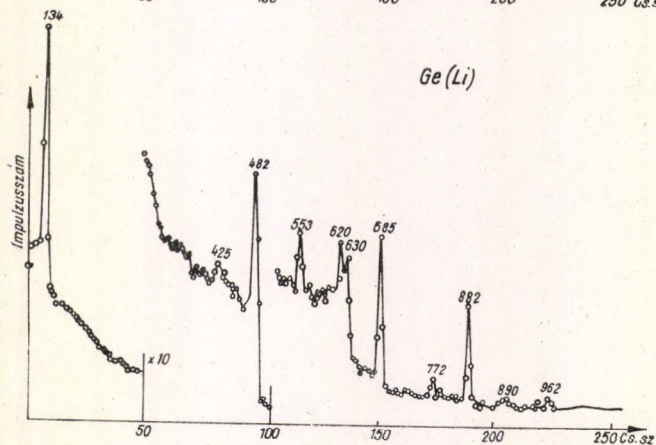
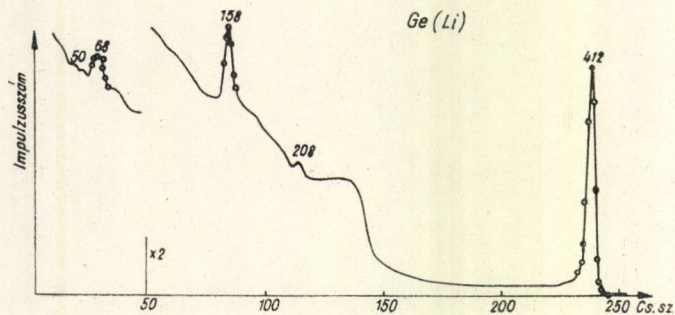
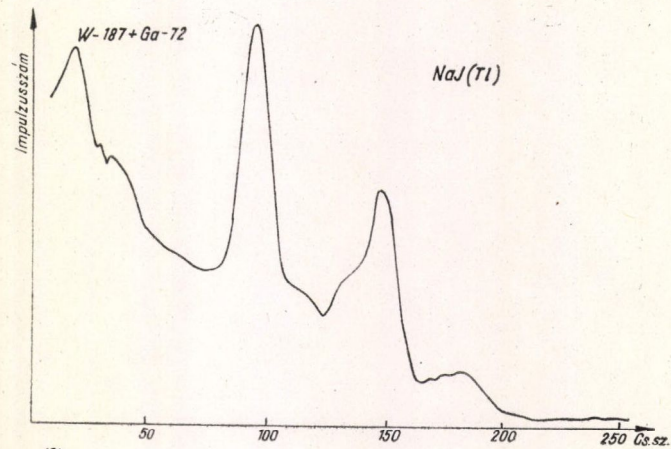
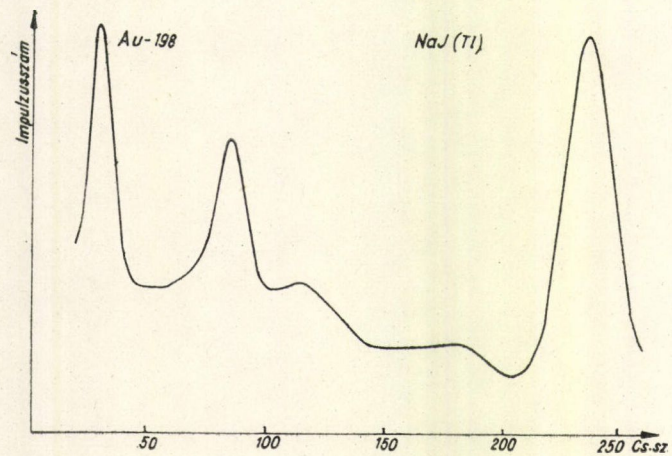
Arany-198. A 11. ábrán egy a hazai reaktorban besugárzott ^{198}Au izotóp spektrumát mutatjuk be. Mind a szcintillációs, mind a félvezető spektrumban csak a 142 KeV-es csúcs származik a ^{198}Au -tól. A kisebb energiájú 50, 158 és 208 KeV energiájú csúcsok a ^{199}Au bomlását kísérő gamma sugárzástól erednek. A 68 KeV-es csúcs pedig mind a ^{198}Au , mind a ^{199}Au belső konverziós átmeneteket követő karakterisztikus sugárzástól származik. A csúcsok intenzitás viszonyából a különböző energiákra vonatkozó effektivitási tényezők korrekcióba vétele után mintegy 8%-os ^{199}Au jelenlétére következettünk, ami megfelelt a besugárzás időtartama, fluxusa, a hatáskeresztmetszetek, valamint a mérés időpontjának figyelembevétele alapján végzett számítások útján adódó értékeknek.

Wolfram-187 és Gallium-72. Az 1. táblázatban feltüntettük a ^{187}W és a ^{72}Ga ,

I. TÁBLÁZAT

^{187}W		^{72}Ga	
E (KeV)	Gyakoriság %	E (KeV)	Gyakoriság %
72	13	600	7
134	10	630	19
479	28	790	3
552	6	810	3
618	8	835	88
686	32	890	8
773	5	1050	5
		1230	1
		1270	1
		1470	4
		1600	10
		1680	1
		1860	5
		2200	29
		2490	9
		2510	17

9. ábra. ^{137}Cs szcintillációs és félvezetős γ -spektruma10. ábra. ^{192}Ir szcintillációs és félvezetős γ -spektruma



11. ábra. ^{198}Au szcintillációs és félvezetős γ -spektruma

12. ábra. $^{187}\text{W} + ^{72}\text{Ga}$ szcintillációs és félvezetős γ -spektruma

irodalomból ismert, főbb vonalak energiáit és azoknak az egy bomlásra vonatkozó %-os intenzitás értékeit. A jobb energia felbontás kedvéért ez esetben úgy állítottuk be berendezésünket, hogy a legtöbb csúcs mindkét izotópból az ábrázolt tartományba essék. Ezért a 12. ábrán a 130—1000 KeV-es energia határok közé eső spektrum részeket mutatjuk be. A táblázatban szereplő energia és intenzitás viszonyokkal jól egyeznek a kísérletileg kapott értékek. A besugárzott mintában a ^{187}W és ^{72}Ga aktivitás arány megfelelt a Gallium-wolframát összetételéből adódó értékeknek. Összefoglalva megállapítható, hogy a radioizotóp készítmények tisztaságvizsgálatához, valamint idegen szennyezők felderítéséhez a szcintillációs számlálókkal szemben a Ge(Li) félvezető detektorok sokkal előnyösebben használhatók. Ezek a radioaktív tisztasági ellenőrző mérések is azon vizsgálati csoportba tartoznak, ahol a jó energia meghatározásának lényegesebb szerep jut, mint az effektivitásnak. A vizsgálatok esetében a nagy csatornaszámú analizátorok ugyancsak döntő jelentőséggel bírnak. Az 1000 és afölötti csatornaszámú analizátorok azok, amelyekkel a természetes és mesterséges radioizotópok bomlását kísérő 0,02—3 MeV-es gamma sugarak félvezető detektorokkal történő spektroszkópiai vizsgálatához és az előfordulható szennyező komponensek meghatározásához szükségesek.

IRODALOM

- [1] 12th Annual Nuclear Science Symposium San Francisco 1965-IEEE Traus on Nucl. Sci. Vol NS-13 No. 1.
- [2] 10th Scintillation and Semiconductor Counter Symposium Washington 1966-IEEE Trans. on Nucl. Sci. Vol. NS-13 No. 3.
- [3] Margaret Beach Glos, Nucleonics 24, No. 5, 44, 1966.
- [4] J. Blok, D. A. Shirley, Phys. Letters 13, 232, 1964.
- [5] E. E. Rindina, J. Uchrin, Atomki közlemények, Debrecen (nyomás alatt).

A KVANTUMTÉRELMELET ALAPELVEI ÉS LEGÚJABB EREDMÉNYEI IV. ALKALMAZÁSOK*

PÓCSIK GYÖRGY

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Intézet

1. §. Bevezetés

Az előző dolgozatok [1, 2, 3] folytatásaként, a térelmélet Wightman-féle megfogalmazásának alapján néhány, a fizikában alapvető szerepet játszó alkalmazást tárgyalunk. A felsorolt alkalmazások bizonyításában főként az analitikus tulajdonságoké [3] a döntő szó.

A dolgozat felosztása a következő. Először a nyaláb-szétbontás tulajdonságát [2] bizonyítjuk a Wightman axiómákból (2. §). Mint tudjuk, az egyetlen vákuum létezése a tér rekonstrukciója során [2] a nyaláb-szétbontás tulajdonságát tételezi fel. A 3. §-ban Jost, illetve Federbush és Johnson tételét bizonyítjuk be, majd rámutatunk a Haag-tétellel való kapcsolatra. Haag tételéből pl. következik a kölcsönhatási kép nemlétezése. Ezután két különösen fontos alkalmazás vizsgálatára térünk rá: spin és statisztika kapcsolata (4. §) és CTP-tétel (5. §). Látni fogjuk, hogy e tételek igen általános keretek között maradvá is érvényesek. A 6. §-ban a lokális terek Borchers-féle ekvivalencia osztályait és az azonos szórásoperátorral rendelkező elméletek kérdését tárgyaljuk. Többek között az általánosított szabad terek problémáira is rámutatunk.

2. §. Nyaláb-szétbontás

A nyaláb-szétbontás tulajdonságát [2,44] alatt már megfogalmaztuk: ha a térszerű négyesvektor, akkor az \mathcal{S}^* -on való konvergencia értelemben

$$\lim_{\lambda \rightarrow \infty} [w(x_1, \dots, x_j, x_{j+1} + \lambda a, \dots, x_n + \lambda a) - w(x_1, \dots, x_j)w(x_{j+1}, \dots, x_n)] = 0. \quad (1)$$

(Itt és a következőkben az [1—3]-ban kialakított jelöléseket használjuk.) Szemléletesen azt mondhatjuk, hogy ha két rendszer nagy térszerű távolsággal elválasztott pontokban foglal helyet, akkor a köztük levő kölcsönhatás eltűnik és a közös Wightman-függvény a két rendszernek megfelelő szorzatra esik szét. A nyaláb-tulajdonságot tehát elvárjuk az elmélettől.

Mielőtt a pontos bizonyításba belekezdenénk, egy hozzátvetőleges indoklást adunk. Tegyük fel a $\varphi_{(1)} \dots \varphi_{(j)} \Psi_0$ „állapot” csak egy A tartományban különbözik lényegesen a vákuumtól, a $\varphi_{(j+1)} \dots \varphi_{(n)} \Psi_0$ pedig valamely B tartományon kívül megegyezik a vákuummal. Ha A és B távolsága pl. hármas értelemben végtelen-

* Érkezett 1966. aug. 2.

hez tart, a $(\Psi_0 \varphi_{(1)} \dots \varphi_{(n)} \Psi_0)$ vákuum-értékben, akkor a $\varphi_{(1)} \dots \varphi_{(j)}$ közelítő vákuumot lát jobboldalán, míg $\varphi_{(j+1)} \dots \varphi_{(n)}$ közelítő vákuumot lát baloldalán, innen (1)-re jutunk.

Az (1) tulajdonság jelen bizonyításában főként w mérsékelt jellegét, a lokális kommutativitást és a spektrum tulajdonságot használjuk. Egyszerűség kedvéért a zérus tömegű részecskéket kizárjuk.

Először tegyük fel, hogy a vizsgált téroperátorok térszerű szeparációknál kommutálnak és tekintsük

$$F_1 = w(x_1, \dots, x_j, x_{j+1} + \lambda a, \dots, x_n + \lambda a) - \quad (2)$$

$$- w(x_1, \dots, x_j) w(x_{j+1}, \dots, x_n),$$

$$F_2 = w(x_{j+1} + \lambda a, \dots, x_n + \lambda a, x_1, \dots, x_j) -$$

$$- w(x_1, \dots, x_j) w(x_{j+1}, \dots, x_n).$$

Célszerűen legyen $a^2 = -1$. Rögzített $x_1 \dots x_n$ -re és nagy λ -ra a lokalitásból $F_1 = F_2$. Minthogy F_1 és F_2 mérsékelt disztribúciók, $F_1 - F_2$ is, írható ([1], 2. Függelék)

$$\begin{aligned} \int (F_1 - F_2)(x_1, \dots, x_n) h(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = \\ = \int D^m G(\lambda; x_1, \dots, x_n) h(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n, \end{aligned} \quad (3)$$

ahol $h \in \mathcal{S}$ tetszőlegesen, $D^m G$ pedig egy polinomokkal majorálható folytonos G függvény véges rendű deriváltja. Az integrálás a $4n$ dimenziós euklideszi téren értendő.

A lokalitásból $D^m G = 0$, valahányszor az euklideszi távolság az $R_0 = \frac{1}{8} \lambda (|a^0| + |a|)^{-1}$ alatt marad. Ugyanis, ha

$$R^2 = \sum_{i=1}^n [(x_i^0)^2 + \underline{x}_i^2] < R_0^2, \quad (4)$$

akkor

$$(x_i - x_k - \lambda a)^2 < |x_i^0|^2 + |x_k^0|^2 + 2|x_i^0| |x_k^0| - \lambda^2 + \quad (5)$$

$$+ 2\lambda[|a^0|(|x_i^0| + |x_k^0|) + |a|(|\underline{x}_i| + |\underline{x}_k|)] < 4R_0^2 - \lambda^2 + 4\lambda R_0(|a^0| + |a|) < 0.$$

Látjuk tehát, hogy

$$\left| \int D^m G h(dx) \right| = \left| \int_{R > R_0} G D^m h(dx) \right| \leq \int_{R > R_0} |G| |D^m h| \quad (6)$$

$$R^{4n-1} dR d\omega \leq \int_{R > R_0} G_0 c \lambda^N R^{Q-q+4n-1} dR d\omega.$$

Az utolsó lépésben $h \in \mathcal{S}$ definíciójából $|D^m h| < cR^{-q}$ -t ($q > 0$ bármilyen, R nagy) és G korlátosságát, $|G| \leq G_0 \lambda^N R^Q$ (λ, R nagy) használtuk ki. Elég nagy $q > 0$ -ra a kapott integrál konvergál és

$$\left| \int (F_1 - F_2) h(dx) \right| < c_1 \lambda^{-p}, \quad (7)$$

ahol $p > 0$ és λ nagy, c_1 állandó.

Vizsgáljuk meg F_1 és F_2 Fourier-transzformáltjának tartóját. A $w(x_1, \dots, x_n + \lambda a)$ vákuum-értékben az $x_j - x_{j+1} - \lambda a$ impulzusa $\sum_1^j p_i$, ezért a megfelelő Fourier-transzformált csak akkor nem tűnik el, ha $\sum_1^j p_i$ az előrekúpban van, illetve a vákuum járuléka a $\sum_1^j p_i = 0$ pontba esik. F_1 Fourier-transzformáltjában a vákuum járuléka $w(x_1, \dots, x_j)w(x_{j+1}, \dots, x_n)$ -nel kiesik. Hasonlóan látható be, hogy F_2 Fourier-transzformáltja csak akkor nem zérus, ha $\sum_1^j p_i$ a hátra kúpba esik. Így, $F_1 - F_2$ Fourier-transzformáltja a $(\sum_1^j p_i)^2 \equiv m^2$ tartományban nem tűnik el, feltéve, hogy a többi impulzus a megfelelő helyen van; m a legalacsonyabb nem-zérus tömeg. Helyettesítsük az előbbi gondolatmenetben $h \in \mathcal{S}$ -et olyan $h_1 \in \mathcal{S}$ -sel, melyre $\mathcal{F}(h_1) = \Theta \mathcal{F}(h)$, ahol

$$\Theta = \begin{cases} 1, & \left(\sum_1^j p_i\right)^2 \equiv m^2, \quad \sum_1^j p_i^0 > 0 \\ 0, & \left(\sum_1^j p_i\right)^2 \equiv m^2, \quad \sum_1^j p_i^0 \leq 0 \end{cases} \quad (8)$$

Most (7)-ben $\int F_1 h_1 = \int F_1 h$ marad csak meg, mivel $\int F_2 h_1 = 0$. Kihasználtuk az $m \neq 0$ -t.

A nyaláb-tulajdonságot oly formában kaptuk meg, hogy (1) bármilyen $\lambda^p, p > 0$ -val szorozva is zérus.

Antikommutáló operátorok esetében is a fenti módon bizonyítunk, azonban célszerűen F_2 -ben a második tagot \pm előjellel írjuk be és $F_1 - F_2$ helyett $F_1 \pm F_2$ -t tekintjük, ahol az előjeleket úgy választjuk, hogy a lokalitásból nagy λ -ra $D^m G = 0$ következzen. F_2 -ben a vákuum járuléka bennmaradhat. (A [4]-ben közölt Ruelle-féle bizonyítás így válik helyessé.)

A nyaláb-szétbontás tulajdonságát eredetileg Haag vezette be 1958-ban az aszimptota-tétel bizonyításánál. Tőle származik az ún. levágott vákuum-érték fogalma is. Ez az összes vákuum-járuléka levonásával keletkezik. A $(\varphi_{(1)} \dots \varphi_{(n)})_0$ levágott vákuum-értéket a következő rekurziós formulával vezetjük be

$$\begin{aligned} (\varphi_1(1))_0 &= (\varphi_1(1))_{0T}, \\ (\varphi_1(1)\varphi_2(2))_0 &= (\varphi_1(1)\varphi_2(2))_{0T} + (\varphi_1(1))_{0T}(\varphi_2(2))_{0T}, \\ (\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3))_0 &= (\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3))_{0T} + (\varphi_1(1))_{0T}(\varphi_2(2)\varphi_3(3))_{0T} + \\ &+ (\varphi_2(2))_{0T}(\varphi_1(1)\varphi_3(3))_{0T} + (\varphi_3(3))_{0T}(\varphi_1(1)\varphi_2(2))_{0T} + \\ &+ (\varphi_1(1))_{0T}(\varphi_2(2))_{0T}(\varphi_3(3))_{0T}, \dots \\ (\varphi_1(1) \dots \varphi_n(n))_0 &= (\varphi_1(1) \dots \varphi_n(n))_{0T} + \sum (\varphi_1(1) \dots)_{0T}(\varphi_k(k) \dots)_{0T}. \end{aligned} \quad (9)$$

Az összegzés x_1, \dots, x_n mindazon felosztásaira történik, melyekkel az n pontot egynél több csoportra oszthatjuk és az operátorok sorrendje $(\)_{0T}$ -ben a baloldali sorrend. Induktíve belátható, hogy a nyaláb-szétbontás következtében a levágott

vákuum-értékek nagy térszerű szeparációknál eltűnnek. A nyaláb-tulajdonságot először *Dell'Antonio* és *Gulmanelli* bizonyították egyidős függvényekre [6]. Az (1) alatti általános esetet *Araki* [7] bizonyította először a lokális kommutativitás használata nélkül, a teljes relativisztikus invariancia, egyetlen vákuum és spektrumfeltételből mérsékelt disztribúciókra. A lokalitást is kihasználva azt is megmutatta, hogy az egyidős, levágott vákuum-értékek λ^p helyett $e^{\lambda\alpha}$ -val szorozva is zérushoz tartanak, ahol $\alpha <$ legkisebb tömeg. $\{x_i\}$ háromdimenziós ponthalmaz átmérője. Másszóval, ha az elméletben levő legkisebb tömeg nem eltűnő, a kölcsönhatás exponenciálisan esik le.

Az (1) nyaláb-tulajdonságot *Jost* és *Hepp* is bizonyították a translációs operátor mátrixelemeinek tanulmányozásával [8], de a teljes Lorentz-invarianciát feltéve.

\mathcal{D} -beli próbafüggvények esetén a transláció-invariancia, lokalitás és spektrumfeltétel biztosítja az exponenciális csökkenést egy térszerű hipersík mentén, a pontok nagy távolságaira [9].

Ruelle, aszimptota-feltételről híressé vált munkájában [10] az (1) finomabb változatát bizonyította.

A nyaláb-tulajdonságot zérus tömegű részecskék esetén is megvizsgálhatjuk [9]. Mint belátható, \mathcal{D} -beli elkenő függvényeket használva, a kölcsönhatás λ^{-2} szerint csökken. (Zérus tömegű részecskék jelenlétekor hosszú hatótávolságú erők is felépnek.)

A nyaláb-szétbontás és *Sudarshan* és *Bardacki* ([2]; (34))-ben ismertetett eredményével kapcsolatban: ha egy valós, skalár tér két elméletének Wightman-függvényei, w_n^1, w_n^2 , minden tulajdonságot kielégítenek (1)-et is beleértve, akkor a $w_n = \alpha w_n^1 + (1 - \alpha) w_n^2$ függvények a nyaláb-tulajdonság kivételével a Wightman-függvények minden tulajdonságával rendelkeznek. Ilyenkor, mint tudjuk, a w_n -ekből rekonstruált térnek nem lehet csak egyetlen vákuuma.

3. §. Jost tétele

A részecske-fizika közelítő számításainál sokszor előfordul, hogy egyes vákuum-értékekhez (formfaktorok, Green-függvények stb.) csak pólusjárulékokat tartunk meg vagy szabad tér közelítésben számolunk. Ezzel kapcsolatban felmerül a kérdés: konzisztens-e a közelítés? Ilyen problémákra *Jost* adott egy választ [11]: Vizsgáljunk egyszerűség kedvéért valós, skalár teret, A . Ha A ciklikus vektora a vákuum és A eleget tesz a Wightman axiómáknak, és $(A(x_0) \dots A(x_n))_0, n \leq 3$ -ra a szabad tér megfelelő függvényeivel egyezik meg, akkor ez minden n -re fennáll.

Másszóval, ha egy, két, három és négyrészecskés vertexeket szabad tér közelítésben számolunk, akkor a teljes elmélet csak szabad részecskéket írhat le.

Először lássuk be, hogy az A -tér forrása eltűnik, $(\square + m^2)A = j = 0$. Ugyanis,

$$(j(x)j(y))_0 = (\square_x + m^2)(\square_y + m^2)(A(x)A(y))_0 = (\square_x + m^2) \quad (10)$$

$$(\square_y + m^2)(A^0(x)A^0(y))_0 = 0,$$

mert A^0 szabad tér, $(\square + m^2)A^0 = 0$. (10) voltaképpen $\|j(f)\Psi_0\|^2 = 0, f \in \mathcal{S}$. Tehát, $j(f)\Psi_0 = 0$, ebből következik a lokalitás felhasználásával

$$(A(r_0)A(r_1) \dots j(r_k) \dots A(r_n))_0 = 0, \quad (11)$$

ahol az (r_0, \dots, r_n) pontok teljesen térszerűek ([3], (25)) és $j = (\square + m^2)A$. Terjesszük ki (11)-et egy T_n -ben eltűnő holomorf függvényként („ék szélére” vonatkozó tétel miatt). Ennek kerületi értéke tetszőleges konfigurációra

$$(A(x_0) \dots j(x_k) \dots A(x_n))_0 = 0, \quad (12)$$

azaz az áram minden mátrixeleme eltűnik (Ψ_0 ciklikus), vagyis $j=0$.

Ha még az

$$[A(x), A(y)] = [A^0(x), A^0(y)] = i\Delta(x-y) \quad (13)$$

egyenletet is sikerül belátni, akkor A valóban szabad teret ír le. Lássuk be először (13)-at a vákuumon. A feltételeket használva direkt kapjuk

$$\|([A(x), A(y)] - i\Delta(x-y))\Psi_0\|^2 = 0. \quad (14)$$

Használjuk ismét a lokalitást

$$\begin{aligned} (A(x_0) \dots A(x_n)[A(x), A(y)] A(y_0) \dots A(y_m))_0 = \\ = i\Delta(x-y)(A(x_0) \dots A(x_n)A(y_0) \dots A(y_m))_0, \end{aligned} \quad (15)$$

ahol $(x-y_k)^2 < 0$ és $(y-y_k)^2 < 0$; $k=0, \dots, m$. A baloldal analitikusan folytatható abba a csöbe, melyben a $(z_0, \dots, z_n, z, \omega, \omega_0, \dots, \omega_m)$ pontok foglalnak helyet és $\text{Im}(z_k - z_{k-1}) \in V_+$, $\text{Im}(z - z_n) \in V_+$, $\text{Im} z = \text{Im} \omega$, $\text{Im}(\omega_0 - \omega) \in V_+$,

$\text{Im}(\omega_k - \omega_{k-1}) \in V_+$. Ebbe a tartományba a jobboldal biztos belefolytatható. Ezért, (15) a folytatásokra is fennáll, ahonnan szokott módon (13) adódik tetszőleges mátrixelemben. Ezzel Jost tételét beláttuk. Ugyanerre az eredményre jutottak *Federbush* és *Johnson* is a [12] munkában. [12]-ben belátták, hogy ha $(A(x)A(y))_0 = (A^0(x)A^0(y))_0$ egyidőben és A kanonikus csererelációnak tesz eleget, akkor A szabad tér. Ugyanis az egyidős kétpont függvény egyértelműen meghatározza a kétpont függvényt, ily módon A feltétlenül szabad téregyenletnek tesz eleget. Hozzávéve a kanonikus csererelációt, A csak szabad tér lehet. Ha kanonikus csere-reláció helyett aszimptota-tételt kötünk ki, akkor ismét $A = A_{\text{in}} = A_{\text{out}}$ (Schroer Jostéval egyidős tétele.)

Jost-tételét beláthatjuk egyedül a $(A(x)A(y))_0 = -i\Delta^+(x-y; m)$ feltevésből is. Ismét közvetlenül kapjuk, hogy $(\square + m^2)A = 0$. Ezért A pozitív és negatív frekvenciás részre bontható, $A = A_+ + A_-$. Minthogy $A_+ \Psi_0$ negatív energiájú állapotok szuperpozíciója, $A_+ \Psi_0 = 0$. Az $A_+(x)A_-(y)\Psi_0$ állapot viszont térszerű négyes-impulzusú állapotok szuperpozíciója; a vákuum egységességéből $A_+(x)A_-(y)\Psi_0 = c(x, y)\Psi_0$. Minthogy $A(x)A(y)$ vákuum-értéke $A_+(x)A_-(y)$ -ével egyenlő, $c = -i\Delta^+(x-y, m)$. Így

$$[A_+(x), A_-(y)]_- \Psi_0 = -i\Delta^+(x-y, m)\Psi_0, \quad (16)$$

ebből

$$[A(x), A(y)]_- \Psi_0 = i\Delta(x-y)\Psi_0 + [A_-(x), A_-(y)]_- \Psi_0. \quad (17)$$

Jelöljön χ tetszőleges állapotot és

$$F(x, y) \equiv (\chi, [A_-(x), A_-(y)]_- \Psi_0). \quad (18)$$

(17) és a lokalitás miatt $F(x, y) = 0$, ha $(x-y)^2 < 0$. Ebből a szokott indoklással

átterhetünk tetszőleges x, y -ra. Tehát (17) utolsó tagja elhagyható és az érvelés (15)-tel folytatódik.

A fentiek alapján nem nehéz látni Haag tételét: Tegyük fel adott két elmélet egy-egy φ_1 , illetve φ_2 kovariáns, lokális hermitikus skalár térrel egy-egy Hilbert-téren. φ_1 és φ_2 hármas forgások alatt meghatározott módon transzformálódik és a megfelelő inhomogén SU_2 generátorok saját Hilbert-terekben léteznek, a megfelelő vákuumokat invariánsul hagyják és létezik egy V unitér operátor, mely rögzített időnél a $(\varphi_1, \dot{\varphi}_1)$ irreducibilis operátorrendszert a $(\varphi_2, \dot{\varphi}_2)$ irreducibilis rendszerbe viszi át. Ekkor abból, hogy φ_1 az $m > 0$ tömeghez tartozó szabad tér, következik, hogy φ_2 is m tömeghez tartozó szabad tér.

(A $\{\varphi_j(f)\}$ elkent téroperátor rendszert irreducibilisnek nevezzük, ha abból, hogy bármely C korlátos operátor minden $\Phi, \Psi \in \mathcal{D}(\varphi_j(f))$ értelmezési tartománya/, minden j -re és $f \in \mathcal{S}$ -re $(\Phi, C\varphi_j(f)\Psi) = (\varphi_j(f)^+\Phi, C\Psi)$, következik, hogy C az egységoperátor konstansszorozosa. Belátható, hogy ha $\{\varphi_j(f)\}$ eleget tesz a Wightman tulajdonságoknak, de nem feltétlenül lokális, a vákuum ciklikus vektora, akkor $\{\varphi_j(f)\}$ irreducibilis.)

Ugyanis, az irreducibilitást kihasználva, egyszerűen V viszi át az egyes vákuumokat és inhomogén forgáscsoport generátorokat egymásba. Innen, az egyik tér egyidejű vákuum-értékei a másik tér megfelelő egyidős vákuum-értékeivel egyeznek meg. Végül, Jost-tételéből az állítás következik.

Haag-tételének egyik jelentős alkalmazása a kölcsönhatási kép nemlétezésének felfedezése. Ha létezne a Heisenberg- és kölcsönhatási képet összekötő V operátor, akkor a Heisenberg-tér is szabad tér volna.

4. §. Spin és statisztika kapcsolata

Jelenlegi tudásunk szerint a lehetséges kvantumstatisztikák közül a természet a Bose—Einstein és Fermi—Dirac statisztikát tünteti ki. Nevezetesen, minden egész spinű részecske Bose—Einstein statisztikát, minden feles spinű pedig Fermi—Dirac statisztikát követ. Másrésről, a térelméletben kommutátorral, illetve antikommutátorral kvantált tér (tehát a tér térszerű szeparációknál kommutál vagy antikommutál önmagával) Bose—Einstein, illetve Fermi—Dirac statisztikára vezet. Ennek megfelelően egész (feles) spinű teret kommutátorral (antikommutátorral) kvantálunk. Ez a spin és statisztika kapcsolata.

Mint a szokásos térelméleti megfogalmazásból ismert, a spin és statisztika kapcsolatát Pauli már a negyvenes években bizonyította, legalábbis szabad terekre [13]. Jelentős azonban, hogy a bizonyítást a Wightman által használt igen általános keretben is véghez vihetjük. A legfontosabb momentum a lokalitás kihasználása ([1] (7)). Lokális kommutativitáson azt értjük, hogy bármilyen térszerű szeparációknál komponensektől függetlenül minden tér önmagával, adjungáltjával és más terekkel kommutál vagy antikommutál. A választás azonban spintől függő és bizonyítható.

Dell'Antonio mutatta meg 1961-ben a következő állítást: ha két tér kommutál (antikommutál) egymással térszerű szeparációknál, akkor az egyik tér és a másik adjungáltja is és viszont [14]. Jelölje $\{\varphi_\mu^i\}$ a vizsgált Wightman-terek, mint mérsékelt disztribúciók összességét, ahol i a térfajtára, μ a komponensekre utal. A tétel szerint bármilyen $(x-y)^2 < 0$ -ra és i, j, μ, ν -re a $[\varphi_\mu^i(x), \varphi_\nu^j(y)]_\pm = 0$ feltétel a

$[\varphi_\mu^i(x), \varphi_\nu^{j+}(y)]_\pm = 0$ feltétellel kompatibilis, ellenkező választásnál valamelyik térszervező komponens eltűnik. Feltételezzük, hogy a vákuum ciklikus $\{\varphi_\mu^i\}$ -re vonatkozóan.

Először egy fontos lemmát látunk be: ha $\varphi_\mu^i(h)\Psi_0 = 0$ minden \mathcal{S} -ből kivett kompakt tartójú $h \in \mathcal{D}(O)$ próbafüggvényre és a vákuum ciklikus, akkor minden x -re $\varphi_\mu^i(x) = 0$.

A feltételből közvetlenül kapjuk, hogy $(\chi, \varphi_\mu^i(x)\Psi_0) = 0$ minden $x \in O$ és $\chi \in K$ -ra, ahol $\bar{K} = \mathcal{K}$ és Ψ_0 ciklikus K -ban ([1], 422. o.). Minthogy a feltételben h tartóját a translációs invariancia felhasználásával eltolhatjuk, nyilván minden x és $\chi \in K$ -ra $(\chi, \varphi_\mu^i(x)\Psi_0) = 0$. Ebből és a lokális kommutativitásból disztribúció értelemben

$$(\chi, \varphi_\mu^i(x) \varphi_{e_1}^{i_1}(x_1) \dots \varphi_{e_n}^{i_n}(x_n) \Psi_0) = 0, \quad (x - x_i)^2 < 0. \quad (19)$$

A $\varphi_{e_i}^i$ operátorok között levő adjungáltakat is a e_i index szimbolizálja. Mármint, miként a Wightman-függvényeket, $(\chi, \varphi_\mu^i(x) \dots \varphi_{e_n}^{i_n} \Psi_0)$ -t is ki lehet analitikusan terjeszteni a $(-x) + i\eta_1, (x - x_1) + i\eta_2, \dots, (x_{n-1} - x_n) + i\eta_n$ pontokból álló csőbe ($\eta_i \in V_-$) tetszőleges valós résszel (hiszen a megfelelő Fourier-transzformált mindenhol eltűnik, kivéve, ha minden egyes négyesimpulzus a fizikai spektrumba esik). Az analitikus kiterjesztés kerületi értéke $(x - x_i)^2 < 0$ -ra (19)-et teljesíti, így az „ék széle”-tétel miatt (19) bármilyen konfigurációra is fennáll, másszóval minden x és $\chi, \Phi \in K$ -ra $(\chi, \varphi_\mu^i(x)\Phi) = 0$, így $\varphi_\mu^i(x) \equiv 0$.

Dell'Antonio állításának bizonyítására áttérve, először is emlékeztetünk a lokális kommutativitás globális természetéről szóló tételre [3]. Ha a lokalitás két térszerűen elválasztott nyílt halmaz között fennáll, akkor bármilyen térszerű szeparációknál is fennáll. Ezért elég \mathcal{S} -ből kivett $h \in \mathcal{D}(O)$ függvényeket használni.

Tekintsük az O és $O_{\lambda,a} = \{x | x - \lambda a \in O, \lambda > 0, a \text{ térszerű vektor}\}$ nyílt halmazokat a Minkowski térben. Az $x \in O_{\lambda,a}$ és $x - \lambda a = y$ pontok térszerűen elválasztottak. Ha λ nagy, O minden pontja $O_{\lambda,a}$ minden pontjától térszerűen szeparált. Legyen f és h két próbafüggvény: $f \in \mathcal{D}(O)$, $h \in \mathcal{D}(O_{\lambda,a})$ és ψ, φ legyen két elem a $\{\varphi_\mu^k\}$ sorozatból. Nyilván

$$(\Psi_0, \psi(f)\varphi^+(h^*)\varphi(h)\psi^+(f^*)\Psi_0) = \|\varphi(h)\psi^+(f^*)\Psi_0\|^2 \geq 0. \quad (20)$$

Legyen λ nagy, akkor a lokális kommutativitást (csak ψ és φ^+ között) felhasználva

$$(-1)^{-F_{\varphi\psi}}(\Psi_0, \varphi^+(h^*)\psi(f)\varphi(h)\psi^+(f^*)\Psi_0) \geq 0, \quad (21)$$

ahol $F_{\varphi\psi} = F_{\psi\varphi}$ 0 vagy 1 aszerint, hogy $\psi(f)$ és $\varphi^+(h)$ kommutál vagy antikommutál. Feltevésünk folytán nagy λ -ra

$$\psi(f)\varphi(h) = (-1)^{F_{\varphi\psi}}\varphi(h)\psi(f), \quad (22)$$

ahol $F_{\varphi\psi}$ 0 vagy 1 aszerint, hogy $\psi(f)$ és $\varphi(h)$ kommutál vagy antikommutál.

Csak az $F_{\varphi\psi} = F_{\psi\varphi}$ választás kompatibilis az axiómákkal! Ugyanis (21), (22)-ből

$$(-1)^{F_{\varphi\psi} - F_{\psi\varphi}}(\Psi_0, \varphi^+(h^*)\varphi(h)\psi(f)\psi^+(f^*)\Psi_0) \geq 0 \quad (23)$$

és $\lambda \rightarrow \infty$ -re a nyaláb-szétbontási tulajdonságot felhasználva

$$(-1)^{F_{\varphi\psi} - F_{\psi\varphi}}\|\varphi(h)\Psi_0\|^2\|\psi(f)\Psi_0\|^2 \geq 0. \quad (24)$$

Tehát, ha sem $\varphi \equiv 0$, sem pedig $\psi \equiv 0$, akkor egyértelműen marad $F_{\varphi\psi} = F_{\psi\varphi}$.

Állításunk gyengébb feltevésekkel is igaz. [15]. Ha φ, ψ maguk nem lokálisak ugyan, de relatív lokálisak minden térhez és egymáshoz is, akkor (24)-ből $\varphi(h)\Psi_0=0$ vagy $\psi(f)\Psi_0=0$ és ebből még nem következik $\varphi \equiv 0$ vagy $\psi \equiv 0$. Azonban (20)-hoz hasonló normák vizsgálatával a következő feltételekre jutunk:

$$\varphi(h)\Psi_0 = \varphi^+(h)\Psi_0 = 0, \text{ vagy } \psi(h)\Psi_0 = \psi^+(h)\Psi_0 = 0.$$

Mármost φ és ψ lokalitását nem kihasználva $\varphi(x) \equiv 0$ következik, hiszen (19) φ_μ^i lokalitása nélkül is fennáll. (19)-ben jobbról az első $\varphi_{\nu k}^i = \varphi_\mu^i, \varphi_\mu^{i+}$ -et a jobboldali vákuum elé vihetjük, feltéve, a többi térrel való lokalitást.

A most megmutatott állítás különböző és egyforma terek akármilyen komponenseire vonatkozik bármilyen térszerű szeparációknál. Különösen fontos az egyforma terek esete. A teljes spin-statisztika kapcsolat megmutatására a tér és adjungáltja közötti csererelációt kell megvizsgálni.

Állítás: A feles (egész) spinű lokális φ_μ -tér bármilyen $(x-y)^2 < 0$ -ra kielégíti a $[\varphi_\mu(x), \varphi_\nu^+(y)]_+ = 0$ ($[\varphi_\mu(x), \varphi_\nu^+(y)]_- = 0$) csererelációt. Feles (egész) spinűnek a valódi, homogén Lorentz csoport végesdimenziós kétértékű (egyértékű) irreducibilis ábrázolásai szerint transzformálódó teret nevezzük.

A tételt Wightman elméletében először Burgoyne bizonyította [16]. Tekintsük a

$$w_{\mu\lambda}(\xi) = (\varphi_\mu(x)\varphi_\lambda^+(y))_0 \quad \xi = x - y \quad (25)$$

$$w'_{\mu\lambda}(\xi) = (\varphi_\mu^+(x)\varphi_\lambda(y))_0$$

Wightman-disztribúciókat, tudjuk, hogy mindkettő analitikusan kiterjeszthető a csőbe, illetve kiterjesztett csőbe. Ha hibás csererelációk teljesülnének, akkor

$$w_{\mu\lambda}(\xi) = \begin{cases} -w'_{\lambda\mu}(-\xi), & \text{egész spin,} \\ w'_{\lambda\mu}(-\xi), & \text{feles spin,} \end{cases} \quad \xi^2 < 0. \quad (26)$$

Ugyanakkor azonban

$$w'_{\mu\lambda}(\xi) = \begin{cases} w'_{\mu\lambda}(-\xi), & \text{egész spin,} \\ -w'_{\mu\lambda}(-\xi), & \text{feles spin} \end{cases} \quad (27)$$

tudniillik az első esetben φ_μ egyértékű, a második esetben pedig kétértékű reprezentáció szerint transzformálódik, tehát $\varphi_\mu\varphi_\lambda^+$ x páros, illetve páratlan számú ξ szorzatát tartalmazza. (Emlékeztetünk arra, hogy ha μ j számú pontozatlan és k pontozott indexet tartalmaz, akkor $\varphi_\mu\varphi_\lambda^+$ olyan spinor, mely $(j+k)$ indexpárral rendelkezik, mindegyikben egy pontozott és pontozatlan indexszel. Ha $(j+k)$ páros (páratlan), φ_μ egyértékű (kétértékű) irreducibilis reprezentáció szerint transzformálódik.)

(26) és (27) kombinálásából $\xi^2 < 0$ -ra

$$w_{\mu\lambda}(\xi) + w'_{\mu\lambda}(\xi) = 0. \quad (28)$$

Az analitikusság következtében (28) minden ξ -re teljesül. Így minden μ -re

$$\|\varphi_\mu(f)\Psi_0\|^2 + \|\varphi_\mu^+(\tilde{f})\Psi_0\|^2 = 0, \quad \tilde{f}(x) = f^*(-x), \quad (29)$$

vagyis minden f -re $\varphi_\mu(f)\Psi_0 = \varphi_\mu^+(\tilde{f})\Psi_0 = 0$ (ez csupán a „rossz” csererelációk és nem a lokalitás következménye) és a lokalitás felhasználásával a fenti lemma alapján $\varphi_\mu = \varphi_\mu^+ = 0$.

Összefoglalva: ha $\varphi_\mu, \varphi_\mu^+$ nem feltétlenül lokális, akkor a „hibás” (26) csere-relációk következménye $\varphi_\mu \Psi_0 = \varphi_\mu^+ \Psi_0 = 0$. Ha $\varphi_\mu, \varphi_\mu^+$ a többi térrel kommutál vagy antikommutál, $\varphi_\mu = 0$. Feltéve, hogy φ_μ és φ_μ^+ egymással kommutálnak vagy antikommutálnak, szükségképpen marad a normális csere-reláció. Dell’Antonio tétele garantálja, hogy ha $[\varphi_\mu, \varphi_\nu^+]$ normális, akkor $[\varphi_\mu, \varphi_\nu]$ -re nem írhatjuk elő a „hibás” lehetőséget. Ha φ_μ maga lokális, akkor marad a teljes normális csere-relációk esete.

Ha a lokalitásba nem értjük bele a komponens függetlenséget, akkor a spin-statisztika kapcsolata csak $\mu = \lambda$ -ra bizonyított.

Látnunk kell, hogy a Wightman-féle elméletben, ahol a terek minden további nélkül nem rendelkeznek részecske interpretációval, közvetlenül a statisztikára tovább kérdezni nem lehet.

Az előzőekben igazolt állítást Jost általánosabban is igazolta (pl. [11]). Minden egyértékű (kétértékű) Wightman-tér kommutátorral (antikommutátorral) kvantálható. Megjegyzés: 1. Egyértékű (kétértékű) tér a valódi homogén Lorentz csoport végesdimenziós, általában reducibilis egyértékű (kétértékű) ábrázolása szerint transzformálódik. Egyértékű (kétértékű) térnél tehát minden $(j+k)$ páros (páratlan). 2. A (25)–(29) alatti bizonyítás közvetlenül átírható reducibilis $\mu = \varrho_1 \dots \varrho_j \dot{\sigma}_1 \dots \dot{\sigma}_k$, $\nu = \kappa_1 \dots \kappa_j \dot{\tau}_1 \dots \dot{\tau}_k$ indexű terekre.

Nem beszéltünk még a különböző terek közötti csere-relációk választásának kérdéséről. Ezt a kérdést először Araki vizsgálta a Wightman-keretben 1961-ben [17]. Nevezzük normális lokalitásnak azt a tulajdonságot, hogy térszerű szeparációknál két egész spinű (feles spinű) tér kommutál (antikommutál) egymással, illetve egy egész spinű tér egy feles spinűvel kommutál. Araki megmutatta, hogy még ha nem is áll fenn a normális lokalitás, hanem a „normálissal ellentétes” jelű csere-relációk is előfordulnak, az eredeti terekből kiindulva mindig definiálható egy irreducibilis, normális lokalitású térendszer. Belátható, hogy az aszimptotikus állapotok a normális lokalitást követik ([4], 161. o.).

5. §. CTP-tétel

A CTP-transzformáció és a Lorentz-transzformációk mai tudásunk szerint a részecske fizika legáltalánosabb szimmetriáit definiálják. Mint ismeretes, $CTP = \Theta$ transzformáció a töltéskongruencia (C), gyenge időtükrözés (T) és hármasszorzás (P) szorzatát értjük. Néhány konkrét példát a § végén soroltunk fel. A következőkben a C, T, P elemi tulajdonságait ismertnek tételezzük fel, valamint utalunk a problémakörrel kapcsolatos, e folyóiratban is megjelent régebbi munkákra [18].

A CTP-tétel kimondja, hogy a Θ transzformáció minden lokális relativisztikus téreelméletben szimmetria. Feladatunk a CTP-tétel Wightman-keretben való megmutatása [11, 19].

Mielőtt a tételt kimondhatnánk, meg kell mondanunk, mit értünk a szereplő transzformációkon. Pl. a jelenlegi általános elméletben C-t, mint részecske — anti-részecske cserét generáló operátort nem definiálhatjuk. Pauli nyomán a következőképpen járhatunk el. A szokásos téreelméleti leírásokból ismerjük a 0, $\frac{1}{2}$, 1 spinű szabad részecskéket T, C, P, Θ operátorait, illetve transzformációit. Tetszőleges $\varphi_\mu = \varphi_{\alpha_1 \dots \alpha_j \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_k}$ spinor térre a Θ transzformációt a legalacsonyabb spinekre ismert

alakokból általánosíthatjuk. Ily módon azt várjuk, hogy a Θ szimmetria az általános esetre a

$$\Theta^{-1} \varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}(f) \Theta = (-1)^J i^{F(\varphi)} \varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}^{\dagger}(\bar{f}) \quad (30)$$

alakban vihető át. Egyszerűség kedvéért a fázisokat lehangyuk, ez az alábbiakat nem érinti. A legegyszerűbb példákat a szokásos fázisválasztással a § végén állítjuk össze. (30)-ban $(\alpha) = (\alpha_1 \dots \alpha_j)$, $(\dot{\beta}) = (\dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_k)$; $F(\varphi) = 0$, ha $(j+k)$ páros és 1, ha $(j+k)$ páratlan; $f(x) = f^*(-x)$ és Θ a CTP-szimmetriát leíró antiunitér, azaz $(\Theta \Psi, \Theta \Psi') = (\Psi', \Psi)$ tulajdonságú operátor. Könnyű látni, hogy legalacsonyabb spinekre (30) valóban a Θ szimmetria szokásos alakja.

A szimmetriák mindig megfigyelhető mátrixelemek vagy vákuum-értékek közt adnak összefüggéseket. Ha (30) valóban szimmetria, a vákuumot is megőrzi, akkor bármely Wightman-függvény a

$$(\Psi_0, \varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}^{(1)}(x_1) \dots \varphi_{(\mu)(\dot{\nu})}^{(n)}(x_n) \Psi_0) = i^F (-1)^J \cdot \quad (31)$$

$$\cdot (\Psi_0, \varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}^{(1)\dagger}(-x_1) \dots \varphi_{(\mu)(\dot{\nu})}^{(n)\dagger}(-x_n) \Psi_0)^*$$

tulajdonsággal rendelkezik. F a baloldal feles spinű tereinek száma, J pedig az $(\alpha) \dots (\mu)$ pontozatlan indexek száma. Nagyon jelentős azonban a következő: ha (31) teljesül az összes különböző fajta Wightman-függvényekre és a vákuum ciklikus, akkor létezik egyetlen, határozatlan fázistól eltekintve egyértelmű, Θ , antiunitér operátor \mathcal{H} -ban és ez a (30) értelemben szimmetria. A bizonyítás ugyanúgy megy, mint ahogy a tér rekonstrukciója során ([2], 2. §) $U(a, \Lambda)$ létezését beláttuk. (1. Defináljuk H állapotain Θ -t úgy, hogy a mögötte álló $\varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}^{(i)}(x)$ -ek helyett $(-1)^J (-i)^{-F(\varphi)} \varphi_{(\alpha)(\dot{\beta})}^{(i)\dagger}(-x)$ -et ír és $\Theta \Psi_0 = \Psi_0$. 2. (31)-et kihasználva belátjuk, hogy Θ antiunitér H -n és (30) is teljesül. 3. Belátjuk, hogy Θ tulajdonságai a H/H_0 téren és innen folytonossággal a \mathcal{H} -n is megmaradnak.)

Az alkalmazások szempontjából ismételtelen hangsúlyozzuk, hogy 1. Ciklikus vákuum (irreducibilis terek) esetén Θ felcserélhető az inhomogén Lorentz-csoport $U(a, \Lambda)$ operátorával, hiszen (30)-ból $\Theta^{-1} U(a, \Lambda) \Theta^{-1} \Theta U(-a, \Lambda)$ felcserélhető minden $\varphi_{\mu}^{(i)}$ -vel, azaz $U(a, \Lambda) \omega(a, \Lambda) = \Theta U(-a, \Lambda) \Theta^{-1}$ és „egyrészesce” állapoton látjuk, hogy $\omega(a, \Lambda) = 1$. Így a CTP-operátor felcserélhető a négyesimpulzus operátorral és $\Theta \Psi_0 = \Psi_0$. (A fázist egységnek választottuk.) Θ antiunitér karaktere a négyesimpulzussal való felcserélhetőségben is kifejezésre jut. Ha Θ unitér volna, negatív energiájú állapotok is léteznének. 2. Irreducibilis terek esetén Θ csak fázis erejéig nem egyértelmű. Ha két Θ is végrehajtaná a (30) transzformációkat, akkor szorzatuk az egységoperátor állandószorozosa lenne, $\Theta_1 \Theta_2 = \lambda$ és $\Theta_1^2 \Theta_2^2 = |\lambda|^2$. Továbbá, $\Theta_1^2 = \mu$, $|\mu| = 1$; innen $\Theta_1 \Theta_1^2 = \Theta_1 \mu = \Theta_1^2 \Theta_1 = \mu \Theta_1$ miatt $\mu = \pm 1$. Ugyancsak $\Theta_2^2 = \mu$, ezért $|\lambda|^2 = 1$ és a két CTP-operátor csakis fázisfaktorban különbözhet. Θ -t $\Theta \Psi_0 = \Psi_0$ egyértelművé teszi.

Wightman-tereknél mindkét tulajdonság fennáll, mert a vákuum ciklikusságából következik a terek irreducibilitása. Összegezve: a CTP-szimmetriát kifejező (30) és a Wightman-függvények (31) alatti CTP-szimmetriája ekvivalensek egymással, feltéve a vákuum ciklikus. A CTP-tétel szerint a Wightman-függvények CTP-szimmetriája minden lokális relativisztikus térelméletben fennáll. Lényeges, hogy lokalitáson nem szükséges a fentiekben mindig használt ún. erős lokalitást érteni, hanem a gyenge lokalitás is elegendő.

Vezessük be a gyenge lokalitás fogalmát [19]. Evégből jelöljük a $(\varphi_\mu^{(1)}(x_1) \dots \varphi_\nu^{(n)}(x_n))_0$ disztribúció $T'_p(P \equiv 1)$ kiterjesztett csőbe [3] való holomorf kiterjesztésének tetszőleges valós regularitási (ez a Jost-pont) helyét $(r_1 \dots r_n)$ -nel. Tudjuk, hogy $(r_1 \dots r_n)$ teljesen térszerű. Gyenge lokalitáson a

$$(\Psi_0, \varphi_\mu^{(1)}(r_1) \dots \varphi_\nu^{(n)}(r_n) \Psi_0) = i^F (\Psi_0, \varphi_\nu^{(n)}(r_n) \dots \varphi_\mu^{(1)}(r_1) \Psi_0) \quad (32)$$

összefüggéseket értjük, ahol F a feles spinű terek száma, $F=0, 2, 4, \dots, n$ tetszőleges és (32)-t az összes Wightman-függvényre és minden $(r_1 \dots r_n)$ -re vonatkoztatjuk. Látjuk, hogy az erős, normális, lokalitásból következik (32), hiszen a tetszőleges térszerű szeparációkkal elválasztott pontok közt a Jost pontok is ott vannak. Az erős lokalitásból azonban a terek más permutációira is következnek (32) típusú megszorítások, miért nem azok valamelyike a gyenge lokalitás? Ez azzal függ össze, hogy a permutált Wightman-függvények UT'_p -re bővítik a $T'_p(P \equiv 1)$ tartományt. Egyedül a (32) jobb oldalának megfelelő permutáció nem vezet a holomorfitási tartomány bővülésére, ezt választjuk. (Világos módon (32) baloldala T'_{n-1} -ben analitikus függvényekre vezet, de T'_{n-1} invariáns $L_+(C)$, így PT alatt, innen $\pm(\zeta_1, \dots, \zeta_n) \in T'_{n-1}$. De $\zeta = A\zeta'$, ahol $A \in L_+(C)$, $\zeta' \in T'_{n-1}$ teljesen szimmetrikusan definiált, így $(\zeta'_1, \dots, \zeta'_{n-1})$ -vel $(\zeta'_{n-1}, \dots, \zeta'_1)$ is $\in T'_{n-1}$, másként $(-\zeta_{n-1}, \dots, -\zeta_1) \in T'_{n-1}$ s ezek (32) jobb oldala kiterjesztésének holomorfitási pontjai.

CTP-tétel: Jelöljenek $\varphi_\mu^{(1)}, \dots, \varphi_\nu^{(n)}$ nem feltétlenül lokális, de a többi axiómát kielégítő tereket. Ha a (32)-ben felírt gyenge lokalitás valamelyik Jost pont valós környezetében teljesül, akkor a (31) alatti CTP-feltétel mindenhol teljesül. Ha pedig a CTP-feltétel teljesül mindenhol, akkor a gyenge lokalitás feltétele is teljesül minden Jost-pontban. (A tétel Ψ_0 ciklikusságától független, csak analitikus tulajdonságokon alapul.)

Bizonyítás: Tudjuk, hogy $(\Psi_0, \varphi_\mu^{(1)}(x_1) \dots \varphi_\nu^{(n)}(x_n) \Psi_0)$ holomorf függvényként terjeszthető ki a kiterjesztett csőbe, T'_{n-1} , és a kiterjesztés invariáns $L_+(C)$ alatt ([3], 3. §), azaz

$$W_{\mu \dots \nu}(A\zeta) = \sum S_{\mu\mu'}(A) \dots S_{\nu\nu'}(A) W_{\mu' \dots \nu'}(\zeta), \quad (33)$$

$$A \in L_+(C), \zeta \in T'_{n-1}$$

és $S(A)$ a valódi homogén Lorentz csoport végesdimenziós ábrázolásának $L_+(C)$ -re való egyértelmű kiterjesztése. $(S(A))$ -t a következőképpen kapjuk. Tetszőleges x_μ -höz hozzárendeljük az $\hat{x} = x^\mu \tau_\mu$ mátrixot, ahol τ^0 2×2 -es egységmátrix és (τ^i) a Pauli mátrixok. Legyen A 2×2 -es egységdeterminánsú mátrix, akkor az $A^+ \hat{x} A = \hat{\tilde{x}}$ újabb négyes x -et definiál $\hat{x}y = \hat{\tilde{x}}\hat{y}$. Ily módon egy $A(A)$ Lorentz-transzformációt definiáltunk. Az $A \rightarrow A(A)$ az A mátrixok $SL(2, C)$ csoportjának homomorfizmusa L_+^+ -re ($A(AB) = A(A)A(B)$, $A(1) = 1$). A $\varphi_{\alpha_1 \dots \alpha_j \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_k}$, $\alpha_i = 1, 2$ és $\dot{\beta}_j = 1, 2$, tér transzformációja $A(A)$ Lorentz transzformációkor

$$\varphi_{\alpha_1 \dots \alpha_j \dot{\beta}_1 \dots \dot{\beta}_k} \rightarrow A_{\alpha_1 \varrho_1} \dots A_{\alpha_j \varrho_j} A_{\dot{\beta}_1 \dot{\sigma}_1}^* \dots A_{\dot{\beta}_k \dot{\sigma}_k}^* \varphi_{\varrho_1 \dots \varrho_j \dot{\sigma}_1 \dots \dot{\sigma}_k} \quad (34)$$

A tárgyalásban használt $S(A)$ ábrázolások így épülnek fel $SL(2, C)$ ábrázolásaként ([1], 2. §) valós Lorentz csoport esetén. Mostmár áttérhetünk valódi komplex Lorentz csoportra. $L_+(C)$ -hez hozzárendeljük az $SL(2, C) \times SL(2, C)$ mátrix-csoportot. A megfeleltetés: legyen x_μ komplex, akkor $\hat{\tilde{x}} = A \hat{x} B^T$ komplex Lorentz-transzformációt generál. $L_+(C)$ mátrix ábrázolásaihoz úgy juthatunk el,

hogy (34)-ben $A_{\beta_x \sigma_x}^*$ -ot $B_{\beta_x \sigma_x}$ -tal helyettesítjük, ezzel definiáltuk a $\varphi_{(\alpha)(\beta)}$ spinorok $L_+(C)$ -re vonatkozó transzformációs törvényét és (38)-ban az $S(\Lambda)$ -kat, $\Lambda = \Lambda(A, B) \in L_+(C)$. Érdekes, hogy $L_+(C)$ -ben $\Lambda = 1$, PT -vel folytonosan összeköthető ([3], (15)-ben $\varphi = \chi$, $0 \leq \varphi \leq \pi$). Ha a $\Lambda = PT$ elem ábrázolása pl. $\Lambda = -1$, $B = 1$, akkor PT hatása $\varphi_{(\alpha)(\beta)}$ -ra a $(-1)^J$ -vel való szorzás.)

Tekintsük (33)-ban a $\Lambda = PT$ elemet,

$$W_{\mu \dots \nu}(\zeta) = (-1)^J W_{\mu \dots \nu}(-\zeta), \quad (35)$$

ahol J $\mu \dots \nu$ pontozatlan indexeinek száma. (35) speciális esetével, (27)-tel már találkozunk.

Nézzük a CPT-tétel első állítását. A gyenge lokalitás kifejezhető holomorf függvényekkel is. Ugyanis, (32)-t feltettük $(r_1 \dots r_n)$ valamilyen valós környezetében, a baloldalt ebből holomorf függvényként terjeszthetjük ki a T'_{n-1} tartományba. De a jobboldal is ugyanide terjeszthető ki. A kiterjesztések, $W_{\mu \dots \nu}(\zeta_1, \dots, \zeta_{n-1})$ és $i^F \tilde{W}_{\nu \dots \mu}(-\zeta_{n-1}, \dots, -\zeta_1)$ valamelyik Jost-pont valamilyen valós környezetében megegyeznek, mert W definíciója szerint ([3] 3. §) ez éppen (32)-t jelenti; ezért T'_{n-1} -ben

$$W_{\mu \dots \nu}(\zeta_1, \dots, \zeta_{n-1}) = i^F \tilde{W}_{\nu \dots \mu}(-\zeta_{n-1}, \dots, -\zeta_1). \quad (36)$$

(35) és (36) kombinálásából

$$W_{\mu \dots \nu}(\zeta_1, \dots, \zeta_{n-1}) = i^F (-1)^J \tilde{W}_{\nu \dots \mu}(\zeta_{n-1}, \dots, \zeta_1) \quad (37)$$

mindenhol T'_{n-1} -ben. Kerületi értékekre áttérve éppen a CTP-feltétel (31) alakjára jutunk.

A fordított állítás hasonlóan látható be. Minthogy a CTP-feltétel mindenhol teljesül és a megfelelő analitikus kiterjesztések léteznek, (37) következik. (35) és (37) kombinációja pedig (36)-ra vezet. Tekintsük (36)-ot T'_{n-1} Jost-pontjaiban, a kapott alak éppen a gyenge lokalitás.

Ezzel a CTP-tételt beláttuk. Ha a vákuum ciklikus, a Θ -szimmetria eleve biztosított. Mint láttuk, a tétel az erős lokalitás nélkül, csak a gyenge lokalitásból is kijön. Szokásos keretben a gyenge lokalitás (Θ) az S -mátrix létezéséhez teljesen elég, míg az erős lokalitás esetleg elentmond a többi feltételnek.

A gyenge lokalitást a normális lokalitással összhangban választottuk. Belátható, hogy ha az abnormális lokalitással összhangban állapítjuk meg a gyenge lokalitást, akkor a téroperátorok a vákuumot megsemmisítik. Ha ugyanis

$$(\varphi_v^+(x) \varphi_\mu(y))_0 = (-1)^{j+k+1} (\varphi_\mu(y) \varphi_v^+(x))_0, \quad (x-y)^2 < 0, \quad (38)$$

akkor a CTP-tétel most

$$(\varphi_v^+(x) \varphi_\mu(y))_0 = -(\varphi_\mu(-y) \varphi_v^+(-x))_0 \quad (39)$$

-re vezet (minden x, y -ra), ahonnan $\varphi_v(f) \Psi_0 = \varphi_v^+(f) \Psi_0 = 0$. Ha az erős lokalitást kikötnénk φ_v , φ_v^+ és a többi terek közt, akkor a (19)-nél tárgyalt lemma értelmében $\varphi_v = \varphi_v^+ = 0$. Az aszimptota-feltétel előírása is $\varphi_v = \varphi_v^+ = 0$ -ra vezet. Ha most φ_v is lokális, kaptuk, hogy φ_v a spin-statisztika tételnek engedelmeskedik. Ezen az uton is a spin-statisztika tételre jutottunk.

Szokásos térelméleti tárgyalásban Θ kapcsolatba hozható a szórás mátrixszal.

Ennek bemutatására tekintsünk egy φ skalár teret aszimptota térrel, $\varphi_{\text{out}}^{\text{in}}$. Ismert módon

$$\varphi_{\text{out}}^{\text{in}}(x) = \varphi(x) - \int \Delta_A^R(x-y)j(y)dy, \quad (40)$$

$$(\square - m^2)\varphi(x) = j(x).$$

Alkalmazzuk Θ -t

$$\Theta\varphi^{\text{in}}(x)\Theta^{-1} = \varphi(-x)^+ - \int \Delta_R(x-y)j(-y)^+dy = \quad (41)$$

$$= \varphi(-x)^+ - \int \Delta_A(x-y)j(y)^+dy = \varphi^{\text{out}}(-x)^+,$$

$$(\Delta_A(-x) = \Delta_R(x)).$$

Jelölje az out-tér CTP-operátorát U , a CTP-tétel miatt U létezik (φ^{out} lokális és irreducibilis)

$$U\varphi^{\text{out}}(x)U^{-1} = \varphi^{\text{out}}(-x)^+. \quad (42)$$

Kihasználva (41)-et

$$\varphi^{\text{out}}(x) = S^{-1}\varphi^{\text{in}}(x)S, \quad (43)$$

és az $S = \Theta^{-1}U$ unitér operátor éppen a szórásoperátor.

A teljesség kedvéért állítsuk össze a P , C , T , Θ szimmetria-operátorok hatását 0 , $\frac{1}{2}$ spinű egyrészecske állapotokra, mostmár a szokásos fázis megjelöléssel. Legyen $\varphi(x)$ egy általános zérus spinű tér.

1. Téltükrözés:

$$P\varphi(x)P^{-1} = \eta_P\varphi(-x, x_0)$$

$$P\Psi_0 = \Psi_0 \quad (44)$$

$$P\Psi_1(\underline{k}; \text{in}) = \eta_P\psi_1(-\underline{k}; \text{in}).$$

Az η_P belső térparitás $+1$ (skalár) vagy -1 (pszeudoskalár). Az aszimptota-terek transzformációs törvényeit mindig $\varphi \rightarrow \varphi_{\text{out}}^{\text{in}}$ -tal kapjuk.

2. Töltéskonjugáció (részecske-antirészecske csere):

Töltött }
töltetlen } terekre

$$C\varphi(x)C^{-1} = \begin{cases} \eta_c^* \varphi^+(x), & |\eta_c|^2 = 1 \\ \eta_c \varphi(x), & \eta_c^2 = 1 \end{cases}$$

$$C\Psi_0 = \Psi_0 \quad (45)$$

$$C\Psi_1(\underline{k}; \text{in}) = \eta_c \Psi_1(\underline{k}; \text{in}) \quad (\text{önkonjugált részecske})$$

és ha $\Psi_1(\underline{k}; \text{in}) \pm$ töltésű, a töltéskonjugált $C\Psi_1(\underline{k}; \text{in}) \mp$ töltésű, \underline{k} impulzusú állapot. Pl. $\eta_{C\pi^+} = \eta_{C\pi^0} = 1$, de a foton belső töltésparitása -1 . (C -invarianciából.) A semleges részecskék nem önkonjugált módon is felépülhetnek, pl. K_0 mezon.

3. Gyenge (Wigner) időtükrözés (T antiunitér):

$$\begin{aligned}
 T\varphi(x)T^{-1} &= \eta_T \varphi^-(\underline{x}, -x_0) \quad |\eta_T|^2 = 1 \\
 T\Psi_0 &= \psi_0 \\
 T\Psi_1(\underline{k}; \text{in}) &= \eta_T \Psi_1(-\underline{k}; \text{out}),
 \end{aligned} \tag{46}$$

mert az operátorok transzformációs törvényében aszimptota terekre áttérve a bal oldalon in, a jobboldalon out írandó (pl. aszimptota-tételre gondoljunk, $Ta_{\text{in}}^+(\underline{k})T^{-1} = \eta_T a_{\text{out}}^+(-\underline{k})$).

4. Erős (Schwinger) időtükrözés, CT. Az $x_0 \rightarrow -x_0$ és részecske-antirészecske cserét írja le. Az előzőkből felírható.

5. Erős megfordítás (CTP-transzformáció), CTP = Θ , Θ antiunitér: A fentiekből

$$\begin{aligned}
 \Theta\varphi(x)\Theta^{-1} &= \eta_S \varphi^+(-x) \quad \eta_S = \eta_C^* \eta_T \eta_P \\
 \Theta\Psi_0 &= \Psi_0 \\
 \Theta\psi_1(\underline{k}; \text{in}) &= \eta' \bar{\Psi}_1(\underline{k}; \text{out}).
 \end{aligned} \tag{47}$$

A felülvonás antirészecske-állapotot jelöl, ettől függően $\eta' = \eta_T \eta_P \eta_C (\eta_C^*)$. A több-részecskés állapotokra C, T, P, Θ hatását mostmár könnyen megkonstruálhatjuk. $\frac{1}{2}$ spinű Dirac-spinor térre

$$\begin{aligned}
 P\varphi(x)P^{-1} &= \eta_P \gamma_4 \varphi(-\underline{x}, x_0), \quad \eta_P = \pm 1, \pm i \\
 C\varphi(x)C^{-1} &= \eta_C^* S_c \bar{\varphi}^T(x), \quad |\eta_C|^2 = 1 \\
 S_c^{-1} \gamma_\lambda S_c &= -\gamma_\lambda^T \\
 T\varphi(x)T^{-1} &= \eta_T S_T \gamma_4^T \varphi(\underline{x}, -x_0), \quad |\eta_T|^2 = 1 \\
 \varepsilon_\lambda S_T^{-1} \gamma_\lambda S_T &= \gamma_\lambda^T, \quad \varepsilon_\lambda = \begin{cases} -1, & \lambda = 1, 2, 3 \\ +1, & \lambda = 4 \end{cases} \\
 \Theta\varphi(x)\Theta^{-1} &= \eta_S \gamma_5^T \varphi^+(-x).
 \end{aligned} \tag{48}$$

Az állapotok transzformációja ugyanaz, mint zérus-spinű esetben, hozzátevé, hogy T és Θ a spineket is fordítják.

Az egyes szimmetriák az S-mátrix elemei között összefüggéseket hoznak létre. Pl. ha T szimmetria, antilinearitása és S-sel való felcserélhetősége rendre az

$$\begin{aligned}
 &(\Psi_{\text{out}}(\underline{k}_1, \underline{s}_1; \dots; \underline{k}_n, \underline{s}_n), \Psi_{\text{in}}(\underline{k}'_1, \underline{s}'_1; \dots; \underline{k}'_n, \underline{s}'_n)) = \\
 &= (\Psi_{\text{out}}(-\underline{k}'_1, -\underline{s}'_1; \dots; -\underline{k}'_n, -\underline{s}'_n), \Psi_{\text{in}}(-\underline{k}_1, -\underline{s}_1; \dots; -\underline{k}_n, -\underline{s}_n)), \\
 &(\Psi_{\text{out}}([\underline{k}, \underline{s}]), \Psi_{\text{in}}([\underline{k}', \underline{s}'])) = (\Psi_{\text{out}}([-\underline{k}, -\underline{s}]), \Psi_{\text{in}}([-\underline{k}', -\underline{s}']))^*
 \end{aligned} \tag{49}$$

kapcsolatokra vezet, hiszen $\Psi_{\text{in}} = S\Psi_{\text{out}}$. Pl. az első azt jelenti, hogy a $(\underline{k}', \underline{s}') \rightarrow (\underline{k}, \underline{s})$ folyamat mátrixeleme a $(-\underline{k}, -\underline{s}) \rightarrow (-\underline{k}', -\underline{s}')$ -ével egyezik meg (reciprocitási tétel vagy gyenge részletes egyensúly elve). Ugyanígy Θ -ból (49)-cel analóg össze-

függéseket kaphatunk, a változás csak annyi, hogy (49) jobboldalán $\Psi_{in}([-\underline{k}, -\underline{s}])$ helyett a töltéskonjugált $\bar{\Psi}_{in}([\underline{k} - \underline{s}])$ áll.

Jelenleg két kérdés merül fel a CTP-szimmetriával kapcsolatban. 1. Teljesen megbízható kísérleti alátámasztása. 2. CTP-szimmetriával rendelkező konkrét nemtriviális elméletek megadása (illetve a bizonyításban kihasznált elvek megmutatása). Pl. egyes renormálhatatlan elméleteknél olyan szingularitások léphetnek fel, melyek a felhasznált analitikus kiterjesztéseket lehetetlenné teszik.

6. §. Térelméletek azonos S -mátrixszal

Azonos szórásmátrixszal rendelkező, különböző elméletek egységes jellemzése nagyon fontos kérdés. Ebben az irányban *Chisholm* [20], illetve *Kamefuchi* és munkatársai [21] tettek lépéseket, amikor pont-transzformációkkal összekötött elméletek S -mátrixainak egyezését vizsgálták. Sokkal pontosabb és általánosabb eredmények fűződnek *Borchers* nevéhez [22], ezek egy része a Wightman-formulázás újabb, szép példáit szolgáltatják. *Borchers* lényegében azt mutatta meg, hogy a lokális tereket ekvivalencia osztályokba (*Borchers*-féle ekvivalencia-osztályok) sorolhatjuk. Valamely ekvivalencia osztályban az egymáshoz képest lokális, ugyanazon a Hilbert-téren ható, \mathcal{P}_+^\dagger ugyanazon ábrázolása szerint transzformálódó terek vannak. A felosztás egyértelmű. *Borchers* azt is megmutatta, hogy ha két tér ekvivalencia osztálya közös és a két tér rendelkezik aszimptotikus, tehát részecskét leíró terekkel, akkor szórásmátrixaik, illetve a megfelelő aszimptota-terek megegyeznek egymással. Ez a kiindulási problémára részleges válasz.

Az is világos, hogy a nemtriviális S -mátrix a szabad tér ekvivalencia osztályán kívül eső terek S -mátrixai között keresendő. Különböző tömegű szabad terek nem lehetnek egy ekvivalencia osztályban.

Egyszerűség kedvéért hermitikus skalár, φ_i tereket vizsgálunk. Mielőtt *Borchers* eredményeit tárgyalnánk, állapodjunk meg a következő szóhasználatban. 1. φ tér lokális, ha önmagával térszerű szeparációknál felcserélhető. 2. φ gyengén lokális, ha minden n -re és Jost-pontra kielégíti a (32)-ben felírt gyenge lokalitási feltételt ($\varphi_n^{(l)} \equiv \varphi$, $l=1, \dots, n$; $F=0$). 3. φ_1 és φ_2 egymáshoz képest lokális, ha térszerű szeparációknál egymással felcserélhetőek. 4. φ_1 és φ_2 egymásra vonatkozóan gyengén lokálisak, ha együtt elégítik ki a gyenge lokalitás (32) feltételeit. (Ha φ_1 gyengén lokális Wightman-tér ciklikus vákuummal, van Θ operátora. Ha φ_2 ugyancsak gyengén lokális, irreducibilis skalár tér, mely ugyanott van értelmezve, ahol φ_1 és φ_1 -gyel közös $U(a, \Lambda)$ operátorral rendelkeznek, valamint φ_1 és φ_2 egymásra vonatkozóan is gyengén lokálisak, akkor egyetlen, közös Θ -val rendelkeznek.) 5. φ_2 gyengén lokális φ_1 -hez képest, ha

$$\begin{aligned} (\Psi_0, \varphi_1(x_1) \dots \varphi_1(x_j) \varphi_2(y) \varphi_1(x_{j+1}) \dots \varphi_1(x_n) \Psi_0) = \\ = (\Psi_0, \varphi_1(x_n) \dots \varphi_1(x_{j+1}) \varphi_2(y) \varphi_1(x_j) \dots \varphi_1(x_1) \Psi_0) \end{aligned} \quad (50)$$

minden n, j -re és Jost-pontra. Ez a feltétel gyengébb, mint a 4. alatti.

Rátérünk a gyenge lokalitásra érvényes tételek tárgyalására.

Legyenek φ_1, φ_2 nem feltétlenül lokális, \mathcal{P}_+^\dagger ugyanazon $U(a, \Lambda)$ reprezentációja

szerint transzformálódó, semleges skalár terek közös $D \subset \mathcal{H}$ értelmezési tartománnyal és a vákuum legyen egyedül φ_1 -re vonatkozóan ciklikus. Ha φ_1 gyengén lokális és φ_2 gyengén lokális φ_1 -hez képest, akkor φ_2 is gyengén lokális. Ezenkívül φ_1 és φ_2 közös Θ operátorral rendelkeznek és egymásra vonatkozóan is lokálisak.

Az állítás kimutatására mutassuk meg, hogy φ_1 Θ operátora (egyértelműen létezik) φ_2 -nek is CTP-operátora. Bármely $\Psi, \Phi \in D$ -re írjuk

$$(\Theta \Phi, \Theta \varphi_2(y) \Theta^{-1} \Theta \Psi) = (\Psi, \varphi_2(y) \Phi). \quad (51)$$

(50)-et feltettük a Jost-pontokra, így a CTP-tételnél látott megfontolás szerint minden x_1, \dots, x_n, y pontban

$$\begin{aligned} & (\Psi_0, \varphi_1(x_1) \dots \varphi_1(x_j) \varphi_2(y) \varphi_1(x_{j+1}) \dots \varphi_1(x_n) \Psi_0) = \\ & = (\Psi_0, \varphi_1(-x_n) \dots \varphi_1(-x_{j+1}) \varphi_2(-y) \varphi_1(-x_j) \dots \varphi_1(-x_1) \Psi_0). \end{aligned} \quad (52)$$

Legyen most Ψ és Φ :

$$\Psi = \varphi_1(f_j) \dots \varphi_1(f_1) \Psi_0, \quad \Phi = \varphi_1(f_{j+1}) \dots \varphi_1(f_n) \Psi_0, \quad (53)$$

$$\Theta \Psi = \varphi_1(\hat{f}_j) \dots \varphi_1(\hat{f}_1) \Psi_0, \quad \Theta \Phi = \varphi_1(\hat{f}_{j+1}) \dots \varphi_1(\hat{f}_n) \Psi_0.$$

Ekkor (52)

$$(\Psi, \varphi_2(y) \Phi) = (\Theta \Phi, \varphi_2(-y) \Theta \Psi). \quad (54)$$

Mint-hogy pedig az (53) típusú állapotok a feltétel szerint mindenütt sűrűk \mathcal{H} -ban, az (51)-gyel való összehasonlítás mutatja

$$\Theta \varphi_2(y) \Theta^{-1} = \varphi_2(-y) \quad (55)$$

mindenütt D -n. (55) és $\Theta \Psi_0 = \Psi_0$ miatt a CTP-szimmetria fennáll, φ_2 valóban gyengén lokális és φ_1 -gyel egymásra vonatkozóan is gyengén lokálisak.

A gyenge lokalitás tranzitív tulajdonság. Érvényes a következő: Tegyük fel $\varphi_i, i=1, 2, 3$ semleges, skalár terek közös értelmezési tartománnyal és közös $U(a, A)$ -val. Legyen φ_1 gyengén lokális, ciklikus vákuummal és φ_2, φ_3 gyengén lokálisak φ_1 -hez képest, akkor $\varphi_2(\varphi_3)$ is gyengén lokális $\varphi_3(\varphi_2)$ -höz képest.

A feltételek következtében (φ_1, φ_2) és (φ_1, φ_3) -nak van Θ operátora, de mint-hogy φ_1 -nek csak egyetlen lehet, a φ_i -k közös Θ operátorral rendelkeznek, így az összes fajta gyenge lokalitási tulajdonságnak is teljesülni kell.

Ily módon, kiindulva gyengén lokális φ terekből, melyek mindegyikének a vákuum ciklikus vektora, Borchers-féle ekvivalencia osztályokat képezhetünk. φ Borchers-osztályában a φ -hez képest gyengén lokális terek találhatók. Az osztályok egyértelműen elkülönülnek.

Jelentős, hogy analóg osztályképzés végezhető el a lokalitás fogalmát használva. Jelöljön $\varphi_i; i=1, 2, 3$ közös tartományon értelmezett, \mathcal{P}_+^\dagger ugyanazon $U(a, A)$ reprezentációja szerint transzformálódó semleges, skalár tereket. Legyen φ_1 lokális és a vákuum rá vonatkozóan ciklikus. Tegyük fel φ_2 és φ_3 a φ_1 -hez képest lokálisak, ekkor φ_2 és φ_3 is lokálisak egymáshoz képest. Ha $\varphi_2 = \varphi_3$, akkor φ_2 is lokális.

Bizonyítás: A feltételek miatt φ_1 gyengén lokális és φ_2, φ_3 gyengén lokálisak φ_1 -hez képest. Ekkor a gyenge lokalitás tranzitivitására hivatkozva, van közös Θ és minden Jost-pontnál

$$\begin{aligned}
& (\Psi_0, \varphi_1(x_1) \dots \varphi_1(x_j) \varphi_2(y_1) \varphi_3(y_2) \varphi_1(x_{j+1}) \dots \varphi_1(x_n) \Psi_0) = \\
& = (\Psi_0, \varphi_1(x_n) \dots \varphi_1(x_{j+1}) \varphi_3(y_2) \varphi_2(y_1) \varphi_1(x_j) \dots \varphi_1(x_1) \Psi_0) = \\
& = (\Psi_0, \varphi_1(x_1) \dots \varphi_1(x_j) \varphi_3(y_2) \varphi_2(y_1) \varphi_1(x_{j+1}) \dots \varphi_1(x_n) \Psi_0).
\end{aligned} \tag{56}$$

Az utolsó lépésben a feltételeket használtuk. Nézzük az első és utolsó vákuum-értéket. Folytassuk analitikusan az elsőt az $(x_1 - x_2 + i\eta_1, \dots, x_j - y_1 + i\eta_j, y_1 - y_2 + i\eta', \dots, x_{n-1} - x_n + i\eta_{n-1})$ csőbe, ahol $\text{Im}(\eta) \in V$ - és az $\eta' = 0$ -nál kapott függvényt egy $\varphi(y_1 - y_2)$ térszerű vektorokat tartalmazó kompakt tartójú próba-függvénnyel kenjük el. Kapunk egy $f_1(\varphi; x_1 - x_2 + i\eta_1, \dots, y_2 - x_{j+1} + i\eta'', \dots, x_{n-1} - x_n + i\eta_{n-1})$ T_n -ben holomorf függvényt. A második vákuum-értékből is egy T_n -ben holomorf, ugyanilyen változós f_2 függvényt kapunk. Az $f(\varphi; z_1, \dots, z_n) = f_1(\varphi; z_1, \dots, z_n) - f_2(\varphi; z_1, \dots, z_n)$ függvény is holomorf T_n -ben, $f(\varphi; z_1^*, \dots, z_n^*)^*$ pedig $-T_n$ -ben. Kerületi értékeik (56) miatt a Jost-pontokban megegyeznek. Ezért az „edge of wedge”-tétel [3] alapján egy komplex környezetben is közös analitikus folytatásnak kell léteznie. A folytatás disztribúcióként tűnik el a Jost-pontokban (innen függvényként). De akkor a folytatás mindenhol eltűnik. Tehát, (56) eleje és vége minden x_1, \dots, x_n -re, de térszerű $(y_1 - y_2)$ -re, megegyezik. Minthogy Ψ_0 a φ_1 ciklikus vektora, kapjuk $[\varphi_2(x), \varphi_3(y)] = 0, (x - y)^2 < 0$.

A fenti eredmények kapcsolatba hozhatók az S -mátrixokkal is. Legyen φ_1 gyengén lokális és a vákuum legyen ciklikus vektora, valamint φ_2 legyen ugyanott értelmezett, ahol φ_1 és legyen gyengén lokális φ_1 -hez képest. φ_1 és φ_2 $U(a, \Lambda)$ -ja legyen közös. Tételezzük fel az aszimptotikus terek létezését és $\varphi_1^{\text{in}} = \varphi_2^{\text{in}}$ -t, valamint legyen a vákuum φ_1^{in} ciklikus vektora. Ekkor $\varphi_1^{\text{out}} = \varphi_2^{\text{out}}$, azaz a két tér szórás-mátrixa azonos. Ez világos, hiszen φ_1, φ_2 közös Θ operátorral rendelkeznek. Alkalmazzuk (41)-et, (43)-at és φ_1^{in} irreducibilitását (egyetlen S).

Az előző állítás igaz marad, ha pl. φ_1, φ_2 lokális, közös $U(a, \Lambda)$ -val és értelmezési tartománnyal rendelkeznek, φ_2 gyengén lokális φ_1 -hez képest, az aszimptotata-terekre kirótt feltételek nem változnak.

Végül, Borchers megmutatta, hogy ha φ_1, φ_2 közös tartományon értelmezett, \mathcal{P}_+^\dagger ugyanazon ábrázolása szerint transzformálódó lokális terek, φ_1 irreducibilis, φ_2 φ_1 -hez képest lokális, valamint aszimptotikus tereik azonos tömegűek, akkor $\varphi_1^{\text{in}} = \pm \varphi_2^{\text{in}}$.

A bizonyítás a szokásos aszimptota-tételen múlik [22].

Ismételn utalunk a § elejére: adott Borchers-osztályhoz egyetlen S -mátrix tartozik. (Borchers-féle osztályokat tárgyaló más munkák pl. [23].)

A Borchers-osztályokkal kapcsolatban természetes megkérdezni egy adott irreducibilis tér ekvivalencia osztályának szerkezetét. Ez a kérdés a legegyszerűbb esetre megoldott. Azonnal látszik, hogy ha A szabad tér, A mellett pl. polinom (\square) $:A^n$: is kielégíti az axiómákat és az osztályban található. Belátható, hogy A ekvivalencia osztályához A különféle fajtájú és fokú deriváltjaiból képzett különféle normál-szorzatok összes véges lineárkombinációi tartoznak és csakis ezek (Epstein, [23]). E tereknek a szórás-mátrixa triviális, $S = 1$.

Araki, Haag és Schroer [24] mutatták meg, hogy ha A lokális és A, j egyike irreducibilis, akkor A és j azonos ekvivalencia osztályba tartoznak. Ha j irreducibilis és invariáns normálszorzat valamilyen szabad A^0 térben és annak deriváltjaiban, akkor 1. $S = 1$, 2. az A^{in} -re felírt (40) alatti Yang—Feldman egyenletnek nincsenek nemtriviális megoldásai, kivéve $j = 0$ és $A = A^{\text{in}} = A^0$.

A legelső állítás Borchers eredményéből következik. A második is igaz, mert (A, j) közös, (j, A^0) közös ekvivalencia osztályban vannak, ekkor mindhárom tér A^0 ekvivalencia osztályban van és $S=1$, $A^{\text{out}}=A^{\text{in}}$. Utóbbiból látjuk, hogy a Yang—Feldman egyenletből lokális megoldást $j=0$, $A=A^{\text{in}}=A^0$ -tól eltekintve nem kaphatunk.

Tehát lokális térelmélet felépítésére nem a (véges számú) normálszorzatokból felépülő forrásokkal kell próbálkozni.

A nemtriviális S -mátrixszal rendelkező elmélet axiomatikus kutatásaiban a következő lépés az általánosított szabad terek bevezetése volt. Általánosított szabad térnek a függvény kommutátorral rendelkező teret nevezzük [25]. Következésképpen a kommutátor függvény (vákuum-érték) a közismert Lehmann-féle spektrál előállítással rendelkezik. Tétel: Ha A lokális, irreducibilis és

$$[A(x), A(y)]_- = B(x-y), \quad (57)$$

ahol B operátor is lehet, akkor A általánosított szabad tér, [26]. Ugyanis,

$$\begin{aligned} [B(x-y), A(z)] &= [[A(x+\xi), A(y+\xi)], A(z)] = \\ &= -[[A(y+\xi), A(z)], A(x+\xi)] - [[A(z), A(x+\xi)], A(y+\xi)], \end{aligned} \quad (58)$$

az utolsó egyenlőségben a Jacobi-identitást használtuk ki. Elég nagy térszerű ξ -re a jobboldal eltűnik, így A irreducibilitása miatt B egy $(x-y)$ -től függő függvény lehet csak.

Az általánosított szabad tér különböző tömegű, független szabad terek diszkrét szuperpozíciójának általánosítása [27]. Ha az A relativisztikus valós tér lokális, a vákuum ciklikus vektora és Fourier-transzformáltja az impulzus tér valamely térszerű pontjának valamely nyílt környezetében eltűnik, akkor A szükségképpen általánosított szabad tér [27, 28].

Az is belátható [29], hogy egy Wightman axiómáknak eleget tevő, ciklikus vákuummal rendelkező tér akkor és csak akkor általánosított szabad tér, ha a két-pont függvény kivételével minden levágott Wightman-függvénye eltűnik.

Vessük ezt össze Greenberg és Licht eredményével: ha egy lokális térelméletnek van aszimptotikus tere és a levágott Wightman-függvényei valamilyen véges rendtől kezdve eltűnnek, akkor $S=1$ [30]. (Szokásos aszimptotikus térelméletben látták be.)

Lényeges szempont azonban, hogy az aszimptota-tér feltételezése az általánosított szabad térre való alkalmazásnál erős megszorítás.

Az ütközési elmélet irányában való haladásról más alkalommal számolunk be.

IRODALOM

- [1] Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 419, 1965.
- [2] Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 431, 1965.
- [3] Pócsik Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, 14, 1, 1966.
- [4] R. F. Streater—A. S. Wightman, PTC, Spin and Statistics and All That, W. A. Benjamin, Inc. 1964.
- [5] R. Haag, Phys. Rev., 112, 669, 1958.
- [6] G. F. Dell'Antonio—P. Gulmanelli, Nuovo Cimento, 12, 38, 1959.
- [7] H. Araki, Annals of Physics, 11, 260, 1960.
- [8] R. Jost—K. Hepp, Helv. Acta Phys., 35., 34, 1962.

- [9] *H. Araki—K. Hepp—D. Ruelle*, *Helv. Acta Phys.*, **35**, 164, 1962.
- [10] *D. Ruelle*, *Helv. Acta Phys.*, **35**, 147, 1962.
- [11] *R. Jost*, előadás, *Lectures on Field Theory and the Many-Body Problem*, New York, 1961, 127. o.
- [12] *P. G. Federbush—K. A. Johnson*, *Phys. Rev.*, **120**, 1926, 1960.
- [13] *W. Pauli*, *Phys. Rev.*, **58**, 716, 1940.
- [14] *G. F. Dell'Antonio*, *Annals of Physics*, **16**, 153, 1961.
- [15] *A. S. Wightman*, előadás, *Theoretical Physics*, IAEA, Vienna 1963, 28. o.
- [16] *N. Burgoyne*, *Nuovo Cimento*, **8**, 607, 1958.
- [17] *H. Araki*, *Journal of Math. Phys.*, **2**, 267, 1961.
- [18] *J. Schwinger*, *Magyar Fizikai Folyóirat*, **12**, 59, 1964
W. Pauli, *Magyar Fizikai Folyóirat*, **13**, 85, 1965.
G. Lüders, *Dansk. Mat. Fys. Medd.*, **28**, 5, 1954.
- [19] *R. Jost*, *Helv. Acta Phys.*, **30**, 409, 1957.
- [20] *J. S. R. Chisholm*, *Nuclear Physics*, **26**, 469, 1961.
- [21] *S. Kamefuchi—L. O'Rai feartaigh—A. Salam*, *Nuclear Physics*, **28**, 529, 1961.
C. A. Orzalesi, *Nuclear Physics*, **48**, 443, 1963.
- [22] *H. J. Borchers*, *Nuovo Cimento*, **15**, 784, 1960.
- [23] *R. Acharya*, *Nuovo Cimento*, **23**, 580, 1962.
M. Guenin—B. Misra, *Helv. Acta Phys.*, **37**, 267, 1964.
H. Epstein, *Nuovo Cimento*, **27**, 886, 1963.
- [24] *H. Araki—R. Haag—B. Schroer*, *Nuovo Cimento*, **19**, 40, 1961.
- [25] *O. W. Greenberg*, *Annals of Physics*, **16**, 158, 1961.
- [26] *A. M. Licht—J. Toll*, *Nuovo Cimento*, **21**, 346, 1961.
- [27] *G. F. Dell'Antonio*, *Journal of Math. Phys.*, **2**, 759, 1961.
- [28] *D. W. Robinson*, *Helv. Acta Phys.*, **35**, 403, 1962.
- [29] *W. Garczynski*, *Journal of Math. Phys.*, **5**, 714, 1964.
- [30] *O. W. Greenberg—A. L. Licht.*, *Journal of Math. Phys.*, **4** 613, 1963.

KÖNYVISMERTETÉS

ERNST JENŐ: BEVEZETÉS A BIOFIZIKÁBA

Akadémiai Kiadó, Budapest, 1967.

Különös jelentősége van annak, hogy magyar nyelven is rendelkezésre áll bevezető jellegű tankönyv a biofizika tudományágába, és éppen a témakör oly kiváló hazai művelőjének tollából, mint Ernst Jenő professzor. A rövid ismertetőnek nem lehet célja, hogy a mű megjelenése alkalmából a biofizika fontosságát, új szellemű tankönyv magyar kiadását indokolja, hiszen — úgy gondoljuk — ezt a feladatot elvégezték az Akadémiai Kiadó illetékes bizottságai és tanácsadói.

A kezünkben levő — mellelleg igen szép kiállítású és terjedelméhez jól megadott tipográfiai problémáihoz és minőségéhez mértén meglepően olcsó áron hozzáférhető — tankönyv azt a célt tűzi ki, hogy első közelítésben hasznos támpont legyen minden biológus — de bizonyára minden orvostanhallgató tanulmányaiban is. A Szerző módszerének egyik alapgondolata, hogy már az érettségizett kezdők számára is mond hasson valamit, ezért a differenciál- és integrálszámítás fegyvertára kényszerül a törvényszerűségek megfogalmazására.

A könyv a biometria elemeivel kezdődik, bemutatja a mérések kiértékelésének módszerét. A második rész „Az anyag szerkezete” címen atomfizikai, molekulafizikai és szilárdtestfizikai ismereteket foglal össze, kitér az oldatok, elektrolitek, kolloidok és egyes a biofizikában centrális fontosságú transzportjelenségek jellemzésére. A harmadik rész, mintegy 230 oldalon, „Az elemi életfolyamatok biofizikájával” foglalkozik. A könyv utolsó, mintegy 50 oldalas részében villant rá a Szerző az „Elméleti biofizika” egyes kérdéseire, a biológiai idő, a termodinamika biológiai alkalmazása és a biokibernetika egyes problémáira.

A könyv természetszerűleg nem nyújt, mert ekkora terjedelem mellett nem is nyújthat, leendő biológus szakemberek számára rendszerezett fizikai ismereteket. A biológusok és orvosok nem nélkülözhetik olyan fizika-monográfia használatát mint pl. Tarján Imre: „Fizika orvosok és biológusok számára”. Ernst Jenő könyvének jelentőségét viszont éppen abban látjuk, hogy a biofizika problémáit a biológia oldaláról közelíti meg, és ezáltal jobban kirajzolódnak azok a reális igények, amelyeket a biofizikában a biológia helyzete támaszt. Legyen szabad idézni a Szerző előszavából:

„Milyen könyvet tartok jónak? Különösen felnőtt és megfelelő előképzettséggel rendelkezők számára olyat, amelyik „nyugtalanná” teszi az olvasót, és így kényszeríti, hogy más forrásokban is utánanézzen a szóban forgó kérdésnek. Ez elvileg különbözik a szokásos „tan”-könyvek szellemétől és megfelel a ma követelte gondolkodó-kutató szellemnek. Természetes, hogy ilyen könyv több irányú problémát vet fel, különösen, mert nincs valódi elődje az irodalomban.”

Ernst Jenő könyve ilyen „izgató” könyv, amelyben sok probléma merül fel, sok nem is jut el a jelenleg ismert és elfogadott megoldásig a szerényre méretezett fegyvertár miatt. E jelentős alapozó mű után érdeklődéssel várjuk azokat a további műveket, amelyekben e sajátos tudományterület a legteljesebb fegyverzetben mutatkozik majd meg és járul hozzá, hogy ez a nálunk is oly szép eredményekkel folyó kutatómunka számára az utánpótlás előtt szélesre táruljon a kapu.

Arányi Iván

RÖVID KÖZLEMÉNY

RUGALMAS FONALÚ INGA LENGÉSE*

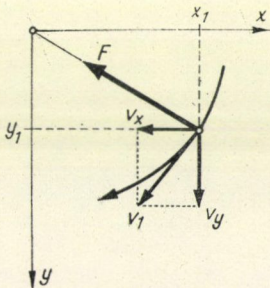
VERMES MIKLÓS

Az 1965. évi tanulmányi versennyel kapcsolatban egy mechanikai probléma vetődött fel. A bonyolult mozgásproblémát csak hosszadalmas numerikus számítással lehetett megközelíteni. A szükséges számításokat a MTA Számítástechnikai Központja Ural II. számítógépen végezte el és ezek a számítások érdekes pályagörbékre vezettek.

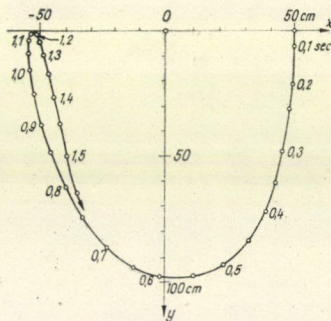
Az 1965. évi állami tanulmányi versenyen szerepelt ez a feladat: Felfüggesztett L hosszúságú rugóra kisméretű testet akasztunk. A rugót a testtel együtt vízszintes helyzetbe hozzuk (a rugó ekkor nyújtatlan állapotban van) és innen elengedjük. Mekkora a rugó megnyúlása, amikor a test a felfüggesztési pont alatt van? A tömegtelennek tekintett rugóra érvényes Hooke törvénye, amely szerint l megnyúlás egyenesen arányos L eredeti hosszal és F erővel: $l = eLF$; e megadott rugóállandó.

A feladat megoldása elemi úton nem lehetséges. A mozgást leíró differenciálegyenlet megoldása nem sikerült, ezért a mozgás lefolyása csak lépésenkénti numerikus számolással volt megismerhető. A számításokat a MTA Számítástechnikai Központja Ural II. számítógépen végezte el. A számítások menete a következő volt.

Legyenek a mozgó m tömeg koordinátái t_1 pillanatban x_1 és y_1 , sebességének összetevői v_{x1} és v_{y1} (az 1. ábra szerinti irányítással). Ebben az állapotban a fonál megnyúlása $l_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2} - L$, a nyújtó erő $F_1 = l_1/eL$. Ennek összetevői $F_1x_1/\sqrt{x_1^2 + y_1^2}$ és $F_1y_1/\sqrt{x_1^2 + y_1^2}$. Ez utóbbi levonandó mg súlyerőből. Az erő x és y irányú összetevőit elosztva m tömeggel megkapjuk a gyorsulás a_{x1} és a_{y1} összetevőit. Amennyiben Δt időköz elég rövid, a mechanika alaptörvényei szerint Δt idő múlva



1. ábra. A számítás adatai



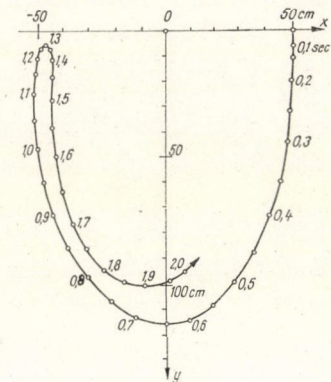
2. ábra. A pálya $m=34$ gramm és $x_0=50$ cm esetében

a sebesség összetevői $v_{x2} = v_{x1} + a_{x1}\Delta t$ és $v_{y2} = v_{y1} + a_{y1}\Delta t$, az új koordináták $x_2 = x_1 + v_{x1}\Delta t + a_{x1}\Delta t^2/2$ és $y_2 = y_1 + v_{y1}\Delta t + a_{y1}\Delta t^2/2$. Így az 1. állapot adataiból közelítő számítással kaptuk meg a 2. állapot adatait, amelyek ezután alapul szolgálnak a következő lépés elvégzéséhez.

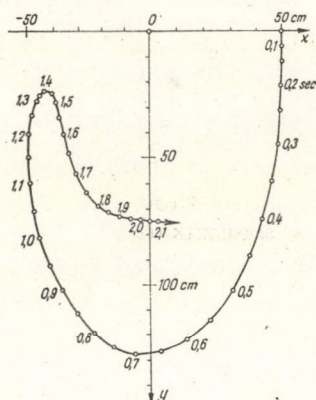
A példaként szereplő rugalmas fonalú inga eredeti hossza $L=50$ cm, rugóállandója $e=10^{-5}$ din $^{-1}$. Első állapotként az indítás $x_0=L$, $y_0=0$, $v_{x0}=0$, $v_{y0}=0$ adatai szerepeltek. Az időköz

* Érkezett 1967. jan. 10.

$\Delta t = 0,01$ sec volt, amellyel az Ural II. számítógép több száz lépést számított végig. Az egyes adatok 9 számjegy pontosságúak voltak; természetesen rajzaink elkészítésekor elegendő volt az adatokat



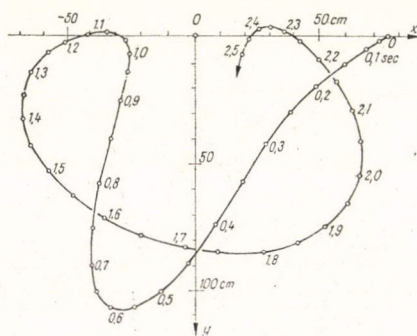
3. ábra. A pálya $m=68$ gramm és $x_0=50$ cm esetében



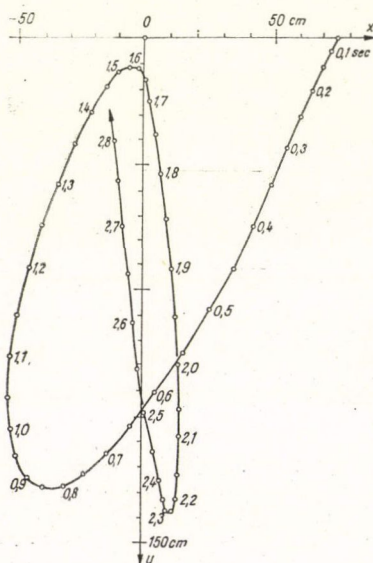
4. ábra. A pálya $m=102$ gramm és $x_0=50$ cm esetében

3 számjegyre figyelembe venni és a mozgó tömeg helyét 0,05 sec-onként felrajzolni. A számítógép 9 számjegyes pontossága a közelítésből eredő hibák továbbszármaztatása ellen nyújtott valamelyes biztonságot. A pályagörbék alakja jól egyezik a rendes, numerikus számolással kapott eredményekkel (Fizikai Szemle 1966. 1. 26).

Az eredményül kapott görbék ellenőrzése az energiamegmaradás törvényével azt mutatta, hogy rendszeres hibák adódnak tovább. Ezért egy második sorozatban a számítógép programozása olyan volt, hogy az intervallum végén érvényes sebességösszetevőket használta fel: $x_2 = x_1 + v_{x2}\Delta t + a_{x1}\Delta t^2/2$ és $y_2 = y_1 + v_{y2}\Delta t + a_{y1}\Delta t^2/2$. Így viszont ellentétes irányú hibák keletkeztek, ezért minden esetben mindkét módon végig-



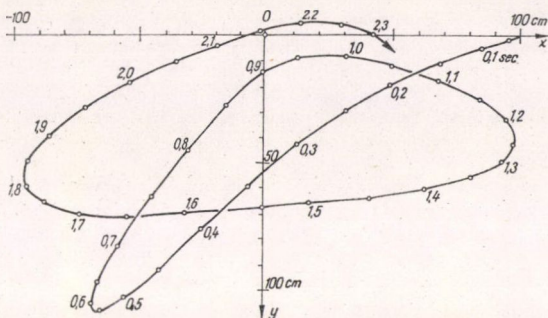
5. ábra. A pálya $m=34$ gramm és $x_0=75$ cm esetében



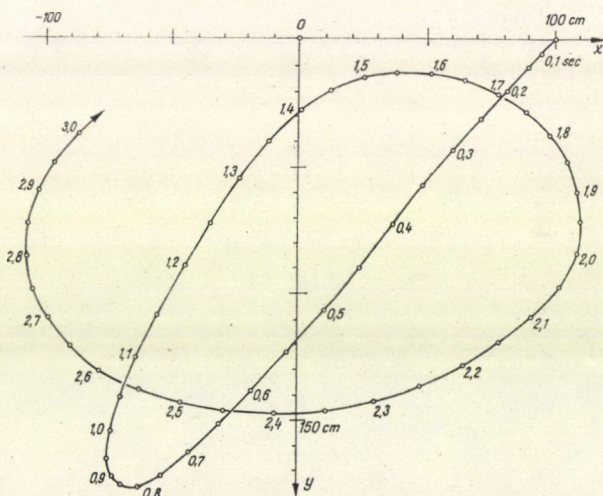
6. ábra. A pálya $m=102$ gramm és $x_0=75$ cm esetében

számoltuk a pályát és a koordináták számtani középértékeit vettük. Amint az alábbi példa mutatja, így az energiamegmaradás törvénye tűrhető pontossággal igazolja a számítás eredményeit.

Az első három végigszámított esetben a tömeg a feladat szövege szerint nyújtatlan fonállal indult, vagyis $t=0$ -kor $x_0=50$ cm, $y_0=0$ cm. Ha a tömeg $m=34$ gramm, a létrejövő mozgás pályáját a 2. ábra tünteti fel. A függőleges helyzetben való áthaladáskor a fonál szinte kétszeresére nyúlik, azután a tömeg majdnem kezdeti magasságáig emelkedik fel, majd hurkolt pályával esik vissza. Érdekes, hogy a lengésidő kb. 2,4 sec, holott a 100 cm hosszú fonálinga lengésideje kb. csak 2 sec, az 50 cm-es ingáé pedig 1,4 sec.



7. ábra. A pálya $m=34$ gramm és $x_0=100$ cm esetében



8. ábra. A pálya $m=102$ gramm és $x_0=100$ cm esetében

A görbe realizását az energiatörvénnyel vizsgálhatjuk meg. $t=1,2$ sec-kor a tömeg mélysége az indulási helyzethez képest 0,738 cm, tehát a nehézségi erő munkavégzése $mgh=2,46 \cdot 10^4$ erg. Ezt a munkavégzést mint a rugalmas és a mozgási energia összegét kell megtalálnunk. Ebben a baloldali szélső helyzetben a fonál hossza 52,31 cm, a megnyúlás 2,31 cm, a rugalmas erő 4600 din és a rugalmas energia $0,53 \cdot 10^4$ erg. A sebesség 0,01 sec-os időközéből számítva 44 cm/sec és a mozgási energia $3,30 \cdot 10^4$ erg. A két energia összege $3,83 \cdot 10^4$ erg, eltérése a $2,46 \cdot 10^4$ erg munkavégzéstől $1,37 \cdot 10^4$ erg, ami a mozgás közben előforduló $3,4 \cdot 10^6$ erg maximális energiához képest nem lényeges. Ez mutatja, hogy az alkalmazott számítógépes eljárás elfogadható pályagörbét ad eredményül.

A 3. és 4. ábra szintén abban az esetben mutatja a mozgás pályáját, ha az indítás nyújtatlan fonállal történt, de a tömegek különböztek. A 3. ábra 68 grammos, a 4. ábra 102 grammos tömegre érvényes. Várható módon nagyobb tömeg mélyebbre jut le és a visszatérő hurok szélesedik, a lengésidő hosszabbodik.

Az alkalmazott eljárás a feladat eredeti kérdésén túlmenően lehetővé tette a pályagörbék megkeresését abban az esetben is, ha az indítás nyújtott fonállal történik. Az 5. ábra esetében a 34 grammos tömeget $x_0 = 75$ cm-es távolságból indítjuk, mintegy belőjük. A keletkező pálya megértéséhez nem szabad elfelejtenünk, hogy 50 cm-nél rövidebb fonálhossz esetében a programozás úgy működik, mintha a rugalmas fonál összenyomásához ugyanakkora, de ellentétes irányú erő lenne szükséges, mint nyújtásához. A valóságban a vékony fonál kihajlása folytán az összenyomáshoz nem szükséges lényegesebb erő. Ha a tömeg 102 grammos, akkor a 6. ábra szerinti pálya keletkezik. Ezekben az esetekben a mozgás már nem emlékeztet ingalengésre. Még távolabbról, $x_0 = 100$ cm-ről indítva a 34 grammos, illetve a 102 grammos tömeget, a 7. és 8. ábrákon látható pályák keletkeznek. Ilyenkor a pályák még kevésbé emlékeztetnek ingalengésre, a tömeg inkább oldalt vágódik ki és nem megy annyira mélyre.

A MTA Számítástechnikai Központja Ural II. számítógépen végezte el a pályaszámításokat. Szelezsán Jánosnak és Varga Gabriellának munkájukért köszönettel tartozom.

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADEMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1967. IV. 24. — Pédányszám: 600 — Terjedelem: 7 (A/5) ív

67-5613 — Szegedi Nyomda

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK
KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 40 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:

43-790-057-181) útján eszközölhetők

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Szabó József és Koltai Ede:</i> Kisintenzitású neutronforrások abszolút intenzitásának mérése	321
<i>Balla János:</i> Hélium kriosztát 2 K°-tól 300 K°-ig terjedő hőmérsékletek előállítására	327
<i>Marx György és Tóth Kálmán:</i> Mezon 35+1 természetrajz	349
<i>Veres Árpád, Uchrin János, Bedrosszian Péter és Uchrin György:</i> Izotópkészítmények radioaktív tisztaságának vizsgálata Ge(Li) félvezető és NaJ(Tl) szcintillációs detektorokkal	365
<i>Pócsik György:</i> A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei IV. Alkalmazások	377
<i>Vermes Miklós:</i> Rugalmas fonalú inga lengése	397

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Abonyi Iván:</i> Ernst Jenő: Bevezetés a biofizikába	396
---	-----

307.226 IV

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánosy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítése a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

SZILÁRDTESTKUTATÁS A SZOVJETUNIÓBAN*

PÁL LÉNÁRD

MTA, Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

1. Bevezetés helyett

Ennek a rövid ismertetésnek a keretében nehéz bemutatni a Szovjetunióban folyó szilárdtestfizikai kutatásokat, sőt még az is alig megoldható feladat, hogy csak a leglényegesebb eredményeket ismertessem. Ehhez is több száz oldalra és nagyon sokrétű tudásra volna szükség. Inkább felidézem néhány fizikus nevét, és elmondom, mit tettek a szovjet szilárdtestfizikáért.

Közismert dolog, hogy tudományos csúcsteljesítményt ma már nem igen lehet koncentrált erőfelfejtés nélkül elérni. Azonban ilyen erőkoncentrálásra csak akkor van lehetőség, ha megvannak az erőforrások. Az erőforrások között az anyagi eszközök természetesen nagy fontosságúak, azonban az alkotó ember szerepe még fontosabb, nemcsak az anyagi eszközök helyes felhasználásának meghatározásában, hanem maguknak az anyagi eszközöknek előteremtésében is. Az alkotó emberek, az invenciózus kutatók legtöbb esetben valamilyen nagyhírű tudományos iskolának köszönhetik első sikereiket. A tudományos iskolák a tudomány legfontosabb erőforrásai. Ezekben az iskolákban születnek az új elvek, az új felismerések, amelyek egy ideig talán nem is igen befolyásolják a gyakorlati tevékenységet, de amelyek sokszor váratlanul szinte forradalmat okoznak a technikai fejlődésben. Az igazi tudományos iskolákat az jellemzi, hogy hatásuk messze túlterjed az egyetem vagy kutató intézet határain, hogy újabb iskolák csíráit hozzák létre, hogy alkotni tudó, önálló gondolkodású tudósokat nevelnek.

Ilyen tudományos iskolát teremtett Leningrádban *A. F. Joffe*, akinek nevéhez nemcsak a szilárdtestfizikai kutatások sok-sok ágának megteremtése fűződik, hanem a szovjet magfizikai kutatások alapjainak lerakása is. Joffe tanítványai között ott találjuk *Kurcsatovot*, *Kapitzát*, *Szemjonovot*, *Frenkelt*, *Kobekót*, *Dorfmant* és még sok kiváló tudóst.

Külön kell megemlíteni *L. D. Landau* nevét, aki ugyancsak Leningrádban tanult és tudományos pályájának kezdetén nem vonhatta ki magát Joffe hatása alól, azonban Landaut mégsem tekinthetjük Joffe közvetlen neveltjének, mert munkássága már a kezdeti időben jelezte, hogy önálló utakon haladó, ritka tehetségű tudósról van szó, aki képes saját alkotói stílusának megfelelő tudományos iskola létrehozására.

Ha nagyon leegyszerűsítve akarnánk jellemezni a helyzetet, akkor röviden azt mondhatnánk, hogy az elméleti módszereket jól értő kísérleti fizikusok döntő többsége Joffe iskolájában, míg a fizikai jelenségek mélyére hatoló, a kísérleti tényeket gondosan elemző elméleti fizikusok nagy többsége pedig Landau iskolájában nevelkedett.

* Érkezett 1967. márc. 23.

2. Szilárdtestek tulajdonságai alacsony hőmérsékleten

Aligha lehetne meggyőzőbben bemutatni az elméleti és kísérleti módszerek egységének fontosságát a fizikai kutatásban, mint éppen szilárdtestek alacsony hőmérsékleten fellépő tulajdonságainak vizsgálatában. Ezek között a tulajdonságok között kiemelkedően fontos helyet foglalnak el a szupravezető állapottal kapcsolatos tulajdonságok.

Joffe tanítványa, Kapitza az alacsony hőmérsékletek fizikájának művelésére Moszkvában elsőrangú kísérleti lehetőségeket teremtett. A mérnök és fizikus szintézisét nagyszerűen megvalósító Kapitza magához vonzotta Landaut, és ez a szövetség a szovjet szilárdtestfizika világhíres eredményeinek lett a bölcsője.

Kapitza munkatársai: *Subnyikov, Salnyikov, Sarvina, Zavarickij, Hajkin* évek hosszú során nagyon sok értékes kísérleti eredményt gyűjtöttek össze a szupravezető anyagokról. Ezeknek a birtokában az elméleti tevékenység is megélénkült.

Landau *Ginzburggal* együtt 1950-ben hosszú cikket közölt a szupravezetés elméletéről. Ez a dolgozat mind a mai napig az érdeklődés középpontjában van, mert bár az elmélet látszólag fenomenologikus, mégis olyan alapvető fizikai elgondolások nyernek megfogalmazást benne, amelyek világosan mutatják, hogy a szerzők mélyen értették a szupravezető állapot létrejöttének mikrofizikai okait is.

A szupravezetés Landau—Ginzburg-elméletének gondolatmenete szorosan kapcsolódik Landaunak egy jóval korábbi, 1937-ből származó dolgozatához, amelyben a szilárdtestek állapotváltozásainak szigorú termodinamikai elméletét alapozta meg.

Landau észrevette, hogy a szilárdtestek állapotváltozásainak egy nagy csoportját jellemezni lehet egy az átalakulási hőmérséklettel eltűnő mennyiséggel, amely az eltűnő állapottal kapcsolatos rendezettség mérőszáma. Például ferromágneses anyagok esetében ez a mennyiség a térfogategységre eső mágnesezettség, amely a Curie-pontban — a ferromágneses állapot megszűnésének hőmérsékletén — zérussá válik. Általános szimmetria megfontolások segítségével Landaunak sikerült olyan módszereket kidolgoznia, amelyekkel megállapíthatók az átalakulás során keletkező lehetséges szerkezetek.

A Landau által tárgyalt átalakulásokat, amelyekre tehát az jellemző, hogy a rendezettség mérőszáma folytonosan válik zérussá, másodrendű fázisátalakulásoknak nevezik.

Landau a szupravezető állapot létrejöttét nem szupravezető állapotból másodrendű fázisátalakulásnak tekintette és a rendezettség mértékét mutató mennyiségnek a szupravezető elektronok számának négyzetgyökét választotta. Az elméletben három kísérletileg meghatározandó paraméter lép fel, amelyek egyébként mikrofizikai megfontolások alapján elméletileg is kiszámíthatók. A Landau—Ginzburg-elméletnek az ad különleges jelentőséget, hogy ennek az elméletnek a segítségével a technológiailag fontos, úgynevezett „kemény” szupravezetők szinte valamennyi, gyakorlatilag fontos jellemzőjét ki lehet számítani, ha az előbb említett három paraméter értéke ismeretes. Az elméletnek külön nagy érdeme, hogy lehetővé teszi a szupravezető anyagok tulajdonságainak leírását mágneses térben. Mivel a szupravezető anyagok gyakorlati felhasználása éppen azzal függ össze, miként változik a szupravezető állapot mágneses tér hatására, aligha lehet túlértékelni a Landau—Ginzburg-egyenlet teljesítőképeségét.

Landau másik jelentős hozzájárulása a szupravezető anyagok fizikájához a szupravezető és nem szupravezető fázisok koegzisztenciájának kimutatásával kap-

csolatos. Felismerve a felületi energia fontosságát, Landau bebizonyította, hogy átmeneti állapotban az anyagon belül normális és szupravezető rétegek váltogatják egymást. Ennek az átmeneti szerkezetnek a felismerése és kísérleti kimutatása ugyancsak nagy jelentőségű a gyakorlati alkalmazás szempontjából.

Landau tanítványai, *Abrikosov* és *Gorkov* méltó folytatói a nagy munkának. *Gorkov* a szupravezetés mikrofizikai elméletéből kiindulva levezette a Landau—Ginzburg egyenleteket. *Abrikosov* nevéhez pedig az úgynevezett másodrendű szupravezető anyagok mikrofizikai elméletének kidolgozása fűződik. Ezekre az anyagokra az jellemző, hogy a szupravezető állapotból a nem szupravezető állapotba való átmenet nem éles, mágneses tér hatására a szupravezető állapot fokozatosan szűnik meg. Ennek az az oka, hogy a másodrendű szupravezető anyagok mindig tartalmaznak szennyezéseket, amelyek megrövidítik a szupravezető elektronpárok korrelációs hosszát, ami negatív felületi energia felléptére vezet (a behatolási mélység és a korrelációs hossz viszonya megnő). A legtöbb, gyakorlatilag használható szupravezető anyag ebbe a kategóriába tartozik, és nem véletlen, hogy a szupravezető anyagok felhasználásával foglalkozó kézikönyvek *Abrikosov* és *Gorkov* elméletét tekintik a tárgyalás kiindulópontjának.

Ennek az eredményes elméleti tevékenységnek a hatására jelentős gyakorlati eredmények is születtek. Szerte a világon mindenütt és így a Szovjetunióban is, napirinden van a szupravezető anyagok felhasználása mind az erősáramú, mind a gyengeáramú technikában. Miniatur méretű, nagy teljesítményű áramgenerátor-modellek készültek, erős mágneses terek előállítására nagyméretű szupravezető mágneseket építettek. Nagy erővel folyik a kutatás a vékony szupravezető rétegek fizikai és technológiai sajátságainak megismerése érdekében, mert nagyon valószínűnek látszik, hogy a szupravezető anyagok rövid időn belül éppen olyan forradalmat idéznek elő a híradástechnikában, mint amit a negyvenes évek második felétől kezdődően a félvezető anyagok okoztak. Olvashatunk olyan közleményeket, hogy szupravezető anyagokból igen gyors működésű memóriákat sikerült előállítani.

Tény azonban, hogy a szupravezető anyagok gyakorlati felhasználásával kapcsolatos helyzetet az jellemzi, hogy egyelőre nagyobb az ötletek gazdagsága, a bátor kezdeményezések száma, mint a ténylegesen alkalmazásra kerülő eszközök megbízhatósága. Téves volna azonban ebből arra következtetni, hogy a szupravezető anyagok felhasználásával kapcsolatos elképzelések az álmok birodalmába tartoznak. Számos jel arra mutat, hogy a közeljövőben ipari realitásként kell számolnunk a szupravezető eszközökkel. A szovjet fizikusok elsőrangú elméleti munkássága, kiváló helyzeti előnyt biztosít a Szovjetunióknak a szupravezető eszközök gyors gyakorlati bevezetéséhez.

Feltétlenül meg kell emlékeznünk arról, hogy az elméleti fizikai módszerek másik világhíres szovjet mestere *N. N. Bogoljubov*, ugyancsak jelentős hozzájárulással gazdagította a szupravezető anyagok matematikai elméletét. Míg Landaunak a közvetlen gyakorlati alkalmazásokat szolgáló elmélet megteremtésében vannak múlthatatlan érdemei, addig *Bogoljubov* a mikrofizikai elmélet olyan szerencsés matematikai megfogalmazását adta, amely hozzásegített ahhoz, hogy a szupravezetés elmélete legyen a modern szilárdtestfizika legjobban kidolgozott, az elsődleges alapelvekre leginkább visszavezetett elmélete.

A szupravezető állapot és a superfolyékonyság állapota elméleti szempontból nagyon sok közös vonást mutat és talán éppen ezzel magyarázható, hogy Landau igen mélyreható megállapításokat tett a szuperfolyékonyság fizikai alapjaival kap-

csolatban is. Érdeklődését a szuperfolyékonyság állapota iránt Kapitza invenciózus kísérletei keltették fel. Landau szerint a szuperfolyékonyság állapota magyarázható, ha feltesszük, hogy a folyékony hélium hidrodinamikai viselkedésének törvényszerűségeit kollektív gerjesztések szabják meg. Ennek megfelelően a szuperfolyékony állapotban levő hélium kvantumfolyadéknak tekinthető, amelyben, ha egy M tömegű és v sebességű test mozog, az csak akkor veszíti el sebességét, azaz csak akkor sűrűlódik, ha elemi gerjesztéseket kelt. Landau olyan típusú elemi gerjesztéseket tételezett fel, amelyek lehetővé tették, hogy egy bizonyos kritikus sebességnél kisebb sebességgel mozgó test ne hozhasson létre elemi gerjesztéseket, azaz sűrűlódás nélkül mozoghasson a cseppfolyós héliumban. Landau azt is kimutatta, hogy a folyékony héliumban a normális hanghullámok mellett a hőmérsékleti hullámok is terjedhetnek a hanghullámok terjedési sebességétől különböző sebességgel. Ezeket a hullámokat, amelyeket másodfajú hanghullámoknak neveznek, *Peskov* részletesen megvizsgálta, és a mérési adatokból meghatározta a hélium elemi gerjesztéseinek spektrumát. *Peskov* mérései igazolták Landau elképzelését. Ma már közismert, hogy a szuperfolyékony héliumra vonatkozó ismereteink legnagyobb része szovjet fizikusoknak köszönhető.

Ha áttekintjük az utolsó 5—10 évben közzétett tudományos dolgozatok közül azokat, amelyek a szilárdtestek alacsony hőmérsékleten fellépő tulajdonságaival foglalkoznak, akkor szembetűnő módon látszik, hogy különösen a szupravezetés elméletében a szovjet fizikusok élenjáró munkát végeztek. Ezt állíthatjuk annak ellenére, hogy a szupravezetés mikrofizikai elméletének kidolgozói nem szovjet fizikusok voltak, mert mindaz, ami a kísérleti munkával és a gyakorlati alkalmazásokkal összefügg, az elsősorban a Landau—Ginzburg elmélethez kapcsolódik és csak bizonyos fundamentális kérdések magyarázata igényli a Bardeen—Cooper—Schrieffer által kidolgozott mikrofizikai elméletet.

3. Szilárdtestek mágneses tulajdonságai

Ha feltennénk a kérdést, hogy ki volt az első fizikus, aki világosan megértette a rendezett mágneses állapot kialakulásának igazi okát, akkor a legtöbben gondolkodás nélkül Heisenberg nevét említenék. Valóban, Heisenberg közölte 1928-ban azt a dolgozatot, amely a szilárd anyagok mágneses tulajdonságainak elméleti vizsgálatában mind a mai napig szinte egyetlen kiindulópontnak számít. Azonban, ha kissé előbbre lapozunk a *Zeitschrift für Physik* 1928-as kötetében, ahol Heisenberg dolgozata megjelent, rábukkanhatunk egy fiatal szovjet fizikus, Frenkel munkájára, aki pár hónappal előbb Heisenberggel azonos elgondolásokat közölt a ferromágnesség létrejöttének feltételeiről. Arról a Frenkelről van szó, aki Joffe tanítványaként nőtt fel, és akit a szilárdtestfizika jelentős művelőjeként tartanak számon.

Nem túlozunk, ha azt állítjuk, hogy a mágnesség modern elméletének kidolgozásában már a kezdet kezdetén résztvettek a szovjet fizikusok. Az elmúlt évtizedekre visszapillantva, a nagy alkotók között ott találjuk Landaut és tanítványait.

Nemrégén a Pergamon Press angol könyvkiadó közreadta Landau cikkeinek gyűjteményét. Lapozgatva a 836 oldalas könyvet, lebilincselő élményt jelent az a sokrétűség, amely Landau munkásságát jellemzi. A könyv átlapozása után már nem csodálkozunk azon, hogy egy 1935-ből származó, *E. M. Lifsiccel* közösen írt dolgo-

zatában megadja a ferromágneses anyagok doménszerkezetének elméletét és felírja a doménfal mozgására azokat az egyenleteket, amelyeket az akkor még meg sem született új technika, a mikrohullámú technika napjainkban is eredményesen alkalmaz. Már ez a körülmény is mutatja, hogy ennek a dolgozatnak sem a hatását, sem a jelentőségét nem lehet túlértékelni, hiszen olyan alkotásról van ismét szó, amely csak első pillanatban látszik tisztán elméleti munkának. A mágneses anyagok mágnesezési folyamatainak megértése nélkül aligha lehetne arra gondolni, hogy tudatosan javítsuk a mágneses anyagok technikai teljesítőképességét. Landau cikke első sorban azért nagyjelentőségű, mert szigorú elméleti módszerekkel a leggyakorlatibb kérdések szakszerű vizsgálatának vetette meg az alapját.

Szovjetunióban a mágneses kutatásoknak nagy hagyományai vannak. Ha bármilyen mágnességgel foglalkozó monográfiát kézbe veszünk, a mágnesezés folyamatainak termodinamikai megalapozói között olvashatjuk *N. Sz. Akulov* nevét, aki a kristályok anizotróp tulajdonságai és a mágnesezés anizotrópiája között ismerte fel a kapcsolatot. Tapasztalati tény, hogy például, a vasból, vagy nikkeltől készített egykristály a különböző kristálytani irányokban különböző mágnesezési sajátságokat mutat. A vas-kristály könnyebben mágnesezhető a kockaélek mentén, míg a nikkelt-kristály a kocka testátlója mentén. Akulovnak sikerült a jelenség termodinamikai elméletét megadni és levezetni a mágnesezési görbe középső és telítési szakaszára vonatkozó összefüggéseket.

A Moszkvai Állami Egyetemen a harmincas években Akulov körül jelentős tudományos kutatómunka bontakozott ki. Munkatársai között találjuk *K. P. Belovot*, aki később a magnetoelasztikus jelenségek és a ritka földfémek mágnességének vizsgálatában ért el jelentős eredményeket.

A magnetoelasztikus jelenségek tanulmányozásának gyakorlati fontossága van, mert a rendkívül kis hőtágulású ötvözetek előállításához ismerni kell a magnetoelasztikus sajátságokat. Belov munkássága tisztázta az „invar” típusú anyagok hőtágulási viszonyait szabályozó mágneses hatások kérdését és sok eredeti gondolatot adott „invar” tulajdonságú, új ötvözetek felkereséséhez.

Ugyancsak a moszkvai egyetemen működő mágneses laboratóriumban tűnt fel *E. I. Kondorszkij is*, aki a koercitív erő elméletét és később pedig az egy-doménszerkezet létezésének feltételeit kifejező összefüggéseket alkotta meg. Ezzel az utóbbi kérdéssel foglalkozó dolgozata nagy gyakorlati jelentőségre tett szert, mivel az állandó mágnesek készítésénél olyan mágneses szerkezet kialakítása kívánatos, amelyben a mágneses tartományok lényegében egy-doménszerkezetű krisztalit szemcsék.

A negyvenes évek elején megindult gyors fejlődés és főként a radartechnika olyan követelményeket állított a kutatók elé, amelyeknek csak úgy lehetett eleget tenni, ha a félvezető mágneses anyagok fizikai, kémiai és technológiai vizsgálatára nagy erőket koncentrálnak. A szovjet szilárdtestfizikusok közül *G. A. Szmolenszkij* az elsők között végezte el azokat a vizsgálatokat, amelyek megvetették a félvezető mágneses anyagok (ferritek) előállítási technológiájának fizikai alapjait. Ezeknek az anyagoknak a segítségével a mikrohullámú technikában két fontos problémát sikerült megoldani: a gyorsan vezérelhető paraméterekkel rendelkező rendszerek és az elektromágneses energia anizotróp terjedését biztosító egységek előállítását.

A félvezető ferromágneses anyagok jelentőségét csak fokozta az a lehetőség, hogy ezek az anyagok jól felhasználhatók információátviteli célokra. Az elektronikus számológépek emlékező elemei gyorsműködésű, négyszögletes hiszterézishurokkal rendelkező ferritgyűrűkből állnak, amelyek tökéletesítése az utóbbi 5–10

évben hihetetlen tempóban haladt előre. Az ezen a téren elért szovjet eredmények biztosítják a szovjet elektronikus számológép-ipar fejlődésének meggyorsulását.

A mágnesezési folyamatok időbeli lefolyásának kísérleti vizsgálatában *Telesznynin* ért el jelentős eredményeket. Régóta ismeretes volt az a jelenség, hogy a mágnesező tér nagyságának megváltozását nem követi azonnal a mágnesezettség értékének megváltozása. Az időbeli elmaradás gyakran jelentős lehet. A mágnesezettség változásában előálló késésnek, az úgynevezett mágneses viszkozitásnak törvényszerűségeit tárták fel *Telesznynin* vizsgálatai, aki kutatásai során a vas-alumínium ötvözetrendszerben felfedezte a szuperviszkozitást. A szuperviszkozus mágneses anyagokban a mágnesezettség csak néhány óra múlva éri el a mágnesező tér megváltozása utáni állapothoz tartozó egyensúlyi értékét. Kiderült, hogy a szuperviszkozitás szoros kapcsolatban van az atomi rendezettséggel és éppen akkor lép fel, amikor az atomi rendezettség kialakulóban van.

Az elektronikus számológépek fejlesztésével kapcsolatban előtérbe került a vékony mágneses rétegek fizikai tulajdonságainak tanulmányozása. *Telesznynin* az utóbbi években a vékony mágneses rétegek mágnesezési folyamatainak tanulmányozására koncentrált figyelmét és jelentősen bővítette a koherens átmágnesezéssel kapcsolatos ismereteinket.

Szverdlovszkban, a szovjet ipar egyik urali központjában *V. Sz. Vonszovszkij* körül jött létre nagy hírű iskola. *Vonszovszkij* egyike volt azoknak, akik először hívták fel a figyelmet arra, hogy a fémek mágneses tulajdonságainak értelmezéséhez nem elegendő az eredeti Heisenberg-féle elgondolás. Az egyes atomokhoz kötött elektronok mágnességén kívül a fémek elektromos vezetőképességéért felelős elektronok mágnességét is figyelembe kell venni; pontosabban: a többé-kevésbé kötött elektronok mágnessége és a vezetési elektronok mágnessége közötti kölcsönhatással is számolni kell. *Vonszovszkij* nevéhez fűződik a híres $s-d$ modell megalkotása, amelynek továbbfejlesztésén ma is sokan dolgoznak.

A *Vonszovszkij*-iskola egyik fiatal tehetséges neveltje *Izjumov*, nagy érdeklődést kíváltó megállapításokat tett az azonos mágneses momentumú atomokból álló kristályrácsba beépített „szennyező” mágneses atomok hatásáról. A nagytisztaságú anyagok fizikai tulajdonságainak jobb megértéséhez szükséges ismerni azokat az effektusokat, amelyeket a „szennyező” atomok okoznak. *Izjumov* eredményei a mágneses szennyezések okozta anomáliákra adnak magyarázatot.

A szilárdtestek mágneses tulajdonságaival foglalkozó kutatók a legutóbbi évtized egyik legnagyobb eredményének azt a felismerést tekintik, amelyre a fiatal *Landau*-tanítvány, *Dzsalsinszkij* jutott *Borovik—Romanov* kísérleti eredményeinek gondos elemzése alapján. A felismerés lényege az, hogy bizonyos szimmetria tulajdonságoknak eleget tevő kristályokban lehetséges a mágneses momentumoknak olyan nem kolineáris elhelyezkedése, amelynek eredményeképpen rendkívül gyenge, kompenzálatlan mágnesezettség jelenik meg.

Régen észrevették, hogy az alfa-hematit, a varakozásokkal szemben gyenge ferromágnességet mutat. Eleinte arra gyanakodtunk, hogy a gyenge ferromágnesség szennyezésekkel kapcsolatos. Amikor azonban *Borovik—Romanov* az igen nagytisztaságú mangánkarbonátban is kimutatta a gyenge ferromágnességet, akkor már kétségtelenné vált, hogy ennek okát nem a szennyezésekben kell keresni. *Dzsalsinszkij* felhasználva a fázisátalakulások elméletében használatos szimmetria megfontolásokat, azonnal értelmezni tudta a gyenge ferromágnesség fellépését. Kiderítette, hogy a mágneses momentumok kolineáris elrendezésétől való kismértékű

eltérésért az elektronok pályamozgása által keltett áram mágneses tere és az elektronok saját mágneses momentuma közötti kölcsönhatás felelős. Ma már a gyenge ferromágnességet a legtöbb kézikönyvben egyszerűen Dzsalosinszkij-mágnességnek nevezik.

A mágneses anyagok kvantumelméletét Bogoljubov és tanítványai kezdettől fogva értékes alkotásokkal gazdagították. Szigorú matematikai módszert dolgoztak ki az alapállapothoz közelfekvő gerjesztett állapotok energiáinak meghatározására, és így a mágnesezettség hőmérsékletfüggését alacsony hőmérsékleten exakt módszerrel határozhatták meg. Munkásságuknak különösen az a része váltott ki élénk nemzetközi visszhangot, amely a kvantumtérelméletből kölcsönzött módszerek szilárdtestfizikai alkalmazásával volt kapcsolatos. Bogoljubov egyik legismertebb tanítványa, *Tyablikov* az úgynevezett Green-függvény technikával tette híressé a nevét, mert sikerült olyan interpolációs formulát származtatnia, amely nagy hőmérséklet tartományban többé-kevésbé jól írja le a mágnesezettség hőmérséklettől való függését. Tyablikov munkája iránti nemzetközi érdeklődésre jellemző, hogy *Boncs-Brujeviccsel* közösen írt könyvét megjelenése után szinte azonnal lefordították angol nyelvre. A mágnesség kvantumelméletéről nemrég megjelent könyvét pedig úgy tartják számon, mint a mágnesség kvantumelméletében alkalmazott matematikai módszerek legjobb kompendiumát.

A Szovjetunióban folyó mágneses kutatásokról nem lehet beszélni anélkül, hogy ne emlékezzünk meg azokról az elsősorban gyakorlati célkitűzésű vizsgálatokról, amelyeket a moszkvai Precíziós Ötvözetek Intézetében végeznek. A híradástechnikai ipar nagy kezdőpermeabilitású és kis veszteségi tényezőjű mágneses ötvözeteket kíván. Erre a célra leginkább a vas-nikkel ötvözetek váltak be. A nagy kezdő permeabilitás elérése azonban igen bonyolult technológiai feladat. Olyan állapotot kell kialakítani az ötvözetben, hogy a mágneses tartományokat elválasztó falak már kis külső télerősség hatására is jelentős elmozdulást szenvedjenek. Ehhez a mágneses anizotrópiára, a magnetostrikcióra, belső feszültségekre, a diszlokáció sűrűsége, a szennyező zárványokra, az atomi rendezettségére vonatkozó adatok nagy tömegét kell ismerni. A technológiai kutatás hatékonyságát mindig az előállított termékek jóságával szokás jellemezni. A Precíziós Ötvözetek Intézete olyan csúcsteljesítményeket ért el, amelyekhez a technológiai folyamatokat meghatározó fizikai törvényszerűségek alapos ismeretére van szükség. A sokféle érdekes munka közül csak *Puzej* vizsgálatairól szeretnék említést tenni. Ha valaki a világon, akkor *Puzej* végezte el a vas-nikkel ötvözetek mágneses anizotrópiájára vonatkozó legkomplexebb kísérleteket. Kitűnő technikával egykristályokat állított elő különböző összetételű vas-nikkel ötvözetekből és tanulmányozta a mágneses anizotrópia hőmérséklettől, összetételtől, és rendállapottól való függését. Ezek az adatok ma a legtöbb kézikönyvben megtalálhatók és fontos szerepet töltenek be a lágy mágneses anyagok technikai jellemzőit javító eljárások megválasztásában.

Természetesen a Szovjetunióban folyó mágneses kutatások minden területéről számot adni aligha lehet, azonban már az eddig felsorolt eredmények is mutatják, hogy a szovjet fizikusok jelentős ismeretekkel gazdagították a szilárdanyag mágneses tulajdonságaira vonatkozó ismereteinket.

4. Amiről még írni kellett volna

Napjainkban gyakran szokták emlegetni, hogy a szilárdtestfizika egyik legfontosabb fejezete a félvezető anyagok fizikája, hiszen ezeknek az anyagoknak az alkalmazása valóságos forradalmat okozott a modern technikában. Könnyen szemrehányás érhet, hogy éppen ennek a fontos kutatási területnek az eredményeiről alig tesztek említést. Erre csak azt válaszolhatom, hogy a félvezető anyagok fizikájában elért szovjet eredmények ismertetésére a jelenleginél jóval nagyobb terjedelmű írás sem volna elegendő. Hogy ez mennyire igaz, azt csupán egyetlen példával szeretném szemléltetni. Leningrádban minden hónapban megjelenik a Fizika Tverdogo Tyela (Szilárdtestek fizikája) című folyóirat egy-egy vaskos kötete. Ez a folyóirat szinte kizárólag félvezető kutatással kapcsolatos eredményeket közöl. Az évenként közölt dolgozatok száma meghaladja az 1200-at. A folyóirat jelentőségét pedig többek között az is mutatja, hogy a benne közölt cikkeket az Egyesült Államokban szinte azonnal lefordítják angol nyelvre és a fordításokból külön folyóiratot szerkesztenek. Egyébként a folyóirat megalapítója és haláláig a szerkesztőbizottság vezetője Abram Fjodorovics Joffe volt.

A szovjet félvezető kutatások eredményei valóban elválaszthatatlanok Joffe nevétől. Évekkel ezelőtt alkalmam volt meglátogatni Joffe laboratóriumában. Az akkor már idős tudós, fiatalokat is megszágyenítő lelkesedéssel magyarázta a félvezetők szerepét a hőenergia elektromos energiává való átalakításában. A körülötte dolgozó kutatók tevékenységére jellemző volt, hogy a félvezető anyagok fontosságát a technikai alkalmazás szinte minden területén látták.

A Szovjetunióban folyó szilárdtestfizikai kutatások egyik kiemelkedő ágát képezik a szilárdtestek elektronszerkezetével kapcsolatos vizsgálatok. Harkovban *I. M. Lifsic* és munkatársai nagyszabású elméleti programot hajtottak végre a szilárdtestek elektronszerkezetének felderítésére.

A fémek legmobilisabb elektronjai, a vezetési elektronok az egész kristályrács hatását érzik; más szóval a szabad elektronoktól többek között abban különböznek, hogy a kristályrácsban elvesztik individuális jellegüket és az egész kristályrácshoz tartozó „elektronfolyadékként” viselkednek. A kristályrács elektrosztatikus potenciáljának periodikus jellege következtében az „elektronfolyadék” energiája tükrözi a kristály szimmetria-tulajdonságait. Az elektronok energiája függ az elektronok impulzusától (az individuális jelleg megszűnése miatt helyesebb volna „kvázi-impulzusról” beszélni) és idealizált esetben ez a függés olyan, hogy az állandó energiájú felületek az impulzus három komponense által meghatározott koordináta-rendszerben gömbfelületek. A valóságban azonban sokkal bonyolultabb a helyzet: egyszerűen és többszörösen összefüggő zárt és nyitott felületrendszerek alakulnak ki, amelyek gyakran emlékeztetnek bennünket az absztrakt szobrászművészet alkotásaira. Ezeknek a felületeknek az elméleti vizsgálatában fejt ki világviszonylatban élenjáró tevékenységet a harkovi Lifsic-iskola.

Nemrég jelent meg Lifsic és munkatársainak eredeti elgondolásokat tartalmazó összefoglaló cikke a Fermi-felületekről és a szilárdtestek vezetési tulajdonságainak szemléletes, félklasszikus elméletéről.

A Fermi-felületek vizsgálatára sok esetben eredményesen lehet használni a töltött részecskék gyorsítására szolgáló ciklotronok működési alapelvét képező effektust. Mágneses térben a vezetési elektronok ugyanis körpályára kényszerülnek, és ha keringési frekvenciájukkal megegyező rezgésszámú elektromos tér is hat

rájuk, rezonanciaszerűen energiát nyelnek el. A harkovi iskola két jeles képviselője *Azbel* és *Kaner* 1956-ban elméletileg kimutatta, hogy a ciklotron rezonancia egyenes következményeként várni lehet, hogy a fémek felületi impedanciája is rezonanciaszerű viselkedést mutat a külső mágneses tér függvényében. Ezt az effektust, amit ma már mindenütt *Azbel—Kaner-effektusnak* neveznek, kísérletileg megtalálták és eredményesen használják a fémek elektronszerkezetének vizsgálatára.

Az utolsó két évtizedben erős kölcsönhatás alakult ki a szilárdtestfizikai és magfizikai kutatások között. A magfizikai vizsgálati módszerek rendkívül finom változások észrevételét tették lehetővé. A szilárdtestek mikrofizikai jelenségeinek világába engednek bepillantást ezek a módszerek. Aligha volna lehetséges a magfizikai módszerekről részletesen írni, azonban legalább egy-két módszerről feltétlenül szükséges említést tenni.

Az egyik legújabb és rohamosan fejlődő vizsgálati módszer a Nobel-díjas *Mössbauer* felfedezésével kapcsolatos. A *Mössbauer-effektus* lényege — mint ismeretes — az, hogy kollektív rezgésekre képes rendszerekben (kristályrács, makromolekulák) a gerjesztett atommagok bizonyos valószínűséggel úgy bocsátanak ki gamma-sugárzást, hogy a kilépő gamma-kvantum a rendszert (kristályt, vagy makromolekulát), mint egészet löki vissza, és így a sugárzás energiája gyakorlatilag változatlan marad, hiszen a rendszer tömege sok-sok nagyságrenddel nagyobb, mint a foton $h\nu/c^2$ tömege.

Ennek a sugárzásnak rendkívül nagyfokú monokromatikussága az a csodálatos tulajdonság, amelyet minden alkalmazásnál kihasználnak.

A szovjet fizikusok közül *Ju. Kagan* elméleti munkássága váltott ki jelentős visszhangot a *Mössbauer-effektus* szilárdtestfizikai alkalmazásával kapcsolatban. Különösen fontos a rácsrezgések és a *Mössbauer-effektus* közötti kapcsolat alapvető fizikai összefüggéseit feltáró munkássága. Az idegen atomokat tartalmazó kristályrácsban kialakuló zavaró rezgések elméletét és azok hatását a *Mössbauer-effektusra* a leg gondosabb formában *Ju. Kagan* dolgozta ki. Elméleti munkásságát az jellemzi, hogy vagy valamilyen kísérleti effektus magyarázatát tűzi ki célul, vagy pedig valamilyen új, kísérletileg kimutatható effektust jósol meg. Legutóbbi nagyszerű munkájában arra hívta fel a figyelmet, hogy a kristályrács periodikus szerkezete egyes esetekben a magreakciók lefolyását is lényegesen befolyásolhatja. Szép feladatnak tűnik ennek a megjósolt effektusnak kísérleti bizonyítása.

A magfizikai módszerek közül szeretném még megemlíteni a neutronspektroszkópiát, amely nagyon hasznosnak bizonyult a szilárdtestekben lejátszódó folyamatok mikrodinamikájának tanulmányozása terén. Kisenergiájú neutronok szilárdtesteken áthaladva megváltoztatják repülési irányukat és energiájukat. A neutronok energiájának megváltozása jellemzi a szilárdtestek gerjeszthető energianívóit és ez azt jelenti, hogy a neutronspektroszkópia módszereivel közvetlenül meghatározhatók a szilárdtestek kollektív mozgásához tartozó energianívók. A kristályrácsok rezgési energiáinak vizsgálatában új korszakot nyitottak a neutronspektroszkópia adta lehetőségek. A Szovjetunióban *Kagan* elméleti tevékenysége nyomán *Pevzner* és munkatársai figyelemre méltó eredményeket értek el reaktortechnikai szempontból fontos fémhidridek rezgési energiájának vizsgálatában.

5. Befejezés helyett

Amikor elkezdtem azon gondolkodni, hogyan lehetne néhány oldalon képet adni a szilárdtestfizikai kutatások szovjet eredményeiről, hosszú ideig tanácstalan voltam. Elképzelhetetlennek tűnt ugyanis előttem minden szokványos megoldás. Végül is, úgy határoztam, hogy arról és azokról írok, amivel és akikkel eddigi munkásságom során közvetlen, vagy közvetett kapcsolatom alakult ki. Ezért az elmondottak magukon viselik a szubjektív választás bizonyos jegyeit. Azonban ezt a „szubjektivizmust” némileg menti az a körülmény, hogy az ember kedves ismerőseiről mindig szívesen ír.

AZ ÁTHALADÁSI SUGÁRZÁS* ÉS AZ ANYAG OPTIKAI TULAJDONSÁGAI**

I. M. FRANK

1. Bevezetés

Harminc évvel ezelőtt, 1934-ben fedezték fel a Cserenkov—Vavilov sugárzás [1], amelyet az elmúlt években több szempontból is vizsgáltak. Legelőször optikailag igyekeztek a jelenséget értelmezni, és azt mint a fénynél nagyobb sebességek optikáját tárgyalták. Később egyszer, s mindenkorra bevonult a magfizikába is. Fontosnak tartom megjegyezni, hogy ezen a jelenségen keresztül került először közvetlen kapcsolatba a magfizika és az optika. Valóban, a Cserenkov—Vavilov sugárzást első sorban három mennyiséggel lehet jellemezni: a részecske töltésével és sebességével és a közeg optikai törésmutatójával. Kiderült, hogy nyilván más jelenségek is vannak, amelyekben fontosak a közeg optikai tulajdonságai a gyors részecske által kibocsátott sugárzásban [2]. Ezek körébe tartozik az úgynevezett áthaladási sugárzás.

Tegyük fel, hogy a gyors töltött részecske vákuumból fémbe lép. Mint ismeretes, legtöbb fémbe elnyelődik az optikai frekvenciákon a fény a hullámhosszánál kisebb vagy avval összemérhető úton. Ily módon a mozgó részecske terének optikai komponensei szinte azonnal nullává válnak, amint az áthaladt a közeg határán. A fémbe való további behatoláskor a részecske mintegy láthatatlanná válik. Nyilvánvalóan ennek sugárzás keletkezéséhez kell vezetnie, amely sugárzás bizonyos fokig analóg a fékezési sugárzással. Ha a részecske energiája elég nagy ahhoz, hogy ne szóródjék a közeg felületi rétegében, és a sebessége sem változik jelentősen, akkor egyenletesen mozognak tekinthetjük¹. Így mivel egyenletesen mozgó részecskéről van szó, a Cserenkov—Vavilov jelenséghez hasonlóan sugárzás jön létre, amely elsősorban a közeg optikai tulajdonságaitól függ. A vákuumból fémbe lépő részecske csak speciális esete ennek a jelenségnek. Sugárzás keletkezik minden alkalommal, valahányszor a részecske két optikailag különböző közeg határán halad át. E jelenség elméletét 20 évvel ezelőtt dolgozta ki V. L. Ginzburg és a szerző [3], és áthaladási sugárzásnak nevezték el. Ma már általánosan elfogadott ez az elnevezés.

Ismeretes, hogy a katódsugárcső anódja világít az elektronok hatására. Az anód fénykibocsátását már nyilván észlelték a röntgensugárzással kapcsolatos első vizsgálatok során, nem sokkal azután, hogy Röntgen felfedezte a röntgensugárzást. De a röntgensőben világít az anóddal egyidejűen az üveg, a csőben levő maradék gázok is, és ez zavarta a megfigyelést. E jelenséget először Lilienfeld — [4] próbálta

* Az orosz eredetiben „переходное излучение”, angolul pedig a „transition radiation” kifejezést fordítottuk áthaladási sugárzásnak.

** A Szovjet Tudományos Akadémia Általános és Alkalmazott Fizikai, valamint Magfizikai Osztályának és az Állami Atomenergia Felhasználási Bizottságnak 1964. december 10-i közös ülésén elhangzott előadás. Megjelent Успехи физических Наук., 87, 189, 1965.

¹ Az út, amelyen nem szabad szórásnak bekövetkeznie, a részecske sebességétől és a fénykibocsátás szögétől függ. Nem-relativisztikus részecske esetén ennek az útnak akkorának kell lennie, amennyit a részecske a fény rezgési periódus idejénél sokkal nagyobb idő alatt tesz meg.

tanulmányozni 1919-ben, amikor lefényképezte az anód által kibocsátott fény spektrumát, és kimutatta, hogy az folytonos. Nem tekintve a kísérleti munkák sorát, a sugárzás természetét még ezután sem derítették fel. Néhány, a sugárzást lumineszcenciának, a fékezési sugárzás különböző formáinak tartó feltételezés látott napvilágot, ezek valóban bizonyos fokig szerepet játszanak a jelenség létrejöttében. Most már szinte hihetetlennek tűnik, hogy egyúttal egy olyan egyszerű és az elektrodinamika egyenleteiből közvetlenül levezethető mechanizmusra nem gondoltak, mint az áthaladási sugárzás. Kétségtelen, hogy ez a jelenség nehezen egyeztethető össze avval a véleménynel, hogy ha egy töltéssel bíró részecske egyenletesen mozog, nem jöhet létre sugárzás. Ez a vélemény csak a Cserenkov—Vavilov jelenség elméletének kidolgozása után dőlt meg. Az áthaladási sugárzás elméletén alapuló számítások kimutatták, hogy a megfigyelhető fénykibocsátásban nem lehet elhanyagolni az áthaladási sugárzást. Pontos kísérleti adatok azonban mégis csak az utolsó néhány évben születtek. Mivel ezek igazolták, hogy az áthaladási sugárzás elmélete a jelenségek helyes leírását adja, azért itt röviden ismertetjük ezen elmélet alapvető eredményeit.

2. Az áthaladási sugárzás elmélete

A kísérletek többségét úgy hajtották végre, hogy vákuumban mozgó töltött részecskék útjába szilárd céltárgyat helyeztek el. Ilyen körülmények között vizsgálták a sugárzásnak a céltárgy felületéről a vákuumba emittált részét. Ez az áthaladási sugárzás elméletének speciális esete, mi is ezt fogjuk vizsgálni. Általános esetben az összefüggések némileg bonyolultabbak. A Cserenkov—Vavilov sugárzáshoz hasonlóan az áthaladási sugárzásnál is lényegtelen, hogy a részecske elektron-e vagy sem. Csak a részecske mozgási sebessége és töltésének nagysága játszik szerepet. Nemrelativisztikus részecskék esetén a sugárzás energiája a sebesség négyzetével arányosan nő. Ezért kíváncsok, hogy a részecske sebessége elég nagy legyen. A kísérletek többségét olyan elektronokkal hajtották végre, amelyeknek az energiája néhány keV és 100 keV közé esett. Ilyen elektronok előállítására nem szükségesek bonyolult berendezések, annál is inkább, mivel a kísérletekhez elegendő néhány tízed mikroamper áramerősség.

Az elektronéval megegyező sebességű proton energiája nyilvánvalóan 1850-szer nagyobb. Ily módon például egy 10 keV energiájú elektron egyenértékű egy 18,5 MeV-es protonnal. Ilyen protonok előállítására gyorsítóra — például ciklotronra — van szükség. Ezért a kísérletek könnyebben elvégezhetők elektronokkal, mint protonokkal. Másrészt elektronok esetén jelentős járulékot ad a fékezési sugárzás optikai tartományba eső része. Protonok esetén ez elhanyagolhatóan kevés. A későbbiekben majd látni fogjuk, hogy bizonyos előnyökkel jár relativisztikus energiájú elektronok alkalmazása, amelyeknek az előállításához szintén gyorsítókra van szükség (például lineáris akcelerator vagy mikrotron).

Először térjünk vissza a nem-relativisztikus energiákhoz. Tételezzük fel, hogy egyenesvonalú egyenletes mozgást végző e töltésű részecske (például elektron) lépi át a vákuum-közeg határt, és a részecske sebességének négyzete $v^2 \ll c^2$. (1. ábra.) A teret a hullámzónában vizsgáljuk, azaz a vákuum-közeg határtól távol. A sugárzási tér amplitúdója a határfelület normálisával φ szöget bezáró irányban a következő tagok összegeként képzelhető el:

a) a vákuumban mozgó és a közeg határán az A pontban hirtelen lefékeződő elektron tere;

b) az elektron tere abban a pillanatban, amikor az A pontból kiindulva mozogni kezd a közegben.

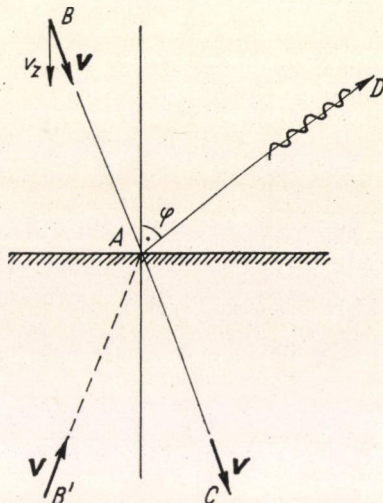
Az első tagnak a részecske megállásakor keletkező fékezési sugárzás tere felel meg. A második tag adja a fékezési sugárzást a részecske hirtelen gyorsulásakor. A két tag együtt megadja az egyenletesen mozgó részecske terét. Ha a közegben a vizsgált frekvencián $\varepsilon = 1$, $\mu = 1$, vagyis ugyanaz a helyzet, mint vákuumban, akkor a tér-amplitúdók mindkét esetben azonos nagyságúak, de ellentétesek és így összegük nulla. Ez megfelel annak a nyilvánvaló ténynek, hogy vákuumban egyenletesen mozgó részecske nem sugároz fényt. Bármilyen más esetben, közeg jelenlétében a két tag kompenzációja nem teljes. Így számításba kell venni egy harmadik tagot is:

c) a részecske elektromos tükörképének terét. Ez ekvivalens egy fiktív részecske terével, amely a közeg belsejéből v sebességgel az A pont felé halad, és ott lefékeződik (lásd 1. ábrát).

A következő összefüggést nyerjük a sugárzás spektrális energiasűrűségére vákuumban a felület normálisával φ szöget bezáró irányban, egységnyi térszögben:

$$\frac{dW_{\omega}}{d\Omega} = \frac{e^2 v_z^2}{4\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi \left| 1 + r - f \frac{1}{n_2} \right|^2. \quad (1)$$

Itt v_z a részecske v sebességének normális menti, a közeg felülete felé irányuló komponense. Az abszolút érték négyzet az említett három tag terének amplitúdó összegéből adódik, a közös tényezőt kiemeltük az abszolút érték jel elé. Az első tag — 1 — megfelel a közeg határán lefékeződő részecske terének. A harmadik tag adja a közegben tovább mozgó részecske terét. Itt f a Fresnel-koefficiens a megtört hullámra. f jelenléte érthető ebben a tagban, mivel a térből csak a megtört hullámnak megfelelő rész jut a közegből a vákuumba. Azonkívül szerepel az $1/n_2$ tényező, ahol n_2 a közeg komplex törésmutatója. E tényezőnek is egyszerű fizikai jelentése van. A vákuumban φ szög alatt megfigyelt hullám a közegben φ' szögben halad, a sugárzási tér pedig a megfelelő szög szinuszával arányos, ebből a törés törvényét figyelembe véve kapjuk az $1/n_2$ tényezőt. Végül a középső tag a részecske elektromos tükörképének terét adja. Az r mennyiség éppen a Fresnel-féle reflexiókoefficiens, és jelentése nyilvánvaló. Mint ismeretes, az r és f koefficiensek nem függetlenek egymástól, és a következő kifejezésekkel adhatók meg:²



1. ábra. Magyarázó rajz az áthaladási sugárzással kapcsolatos elméleti megfontolásokhoz (1) összefüggés). BAC — a vákuumból a közegbe tartó e töltésű, v sebességű részecske útja; $B'A$ — a részecske elektromos tükörképének útja, amelyik a közeg belsejéből a felület felé halad. A sugárzás energiasűrűségét a távoli D pontban számoljuk (a normálissal φ szöget bezáró irányban.)

² Ne csodálkozzunk azon, hogy itt a vákuumból a közegbe haladó megtört hullám reflexiók együttjárója szerepel, bár a valóságban a fény a közegből megy a vákuumba. Ez a sajátosság avval kapcsolatos, hogy a fényforrás a határfelületen helyezkedik el, a teret pedig egy attól távoli pontban határozzuk meg. Az eredmény helyességéről könnyű meggyőződni. [3]

$$r = \frac{n_2^2 \cos \varphi - \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi}}{n_2^2 \cos \varphi + \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi}}, \quad (2)$$

$$f = \frac{2n_2 \cos \varphi}{n_2^2 \cos \varphi + \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi}}. \quad (3)$$

Ennélfogva könnyen felírható a sugárzás spektrális energiasűrűsége akár r , akár f segítségével. Valóban,

$$1 + r = f \cdot n_2. \quad (4)$$

Ebből a következőt kapjuk:

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 v_z^2}{4\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi |1 + r|^2 \left| 1 - \frac{1}{n_2^2} \right|^2. \quad (5)$$

Az (1) és (5) összefüggéseket először arra az esetre határozták meg, amikor a részecske a határfelület normálisa irányában haladt. De mint azt *Pafomov* [5] kimutatta, nem-relativisztikus részecskék esetén alkalmazhatók ferde beesésre is, ha v -t v_z -vel helyettesítjük (az 1. ábrán látható módon). A sugárzás energiája $e^2 v_z^2$ -tel arányos, spektruma pedig nem függ a sebességtől, a közeg optikai tulajdonságai határozzák meg. A rezgések elektromos vektora optikailag izotóp közegben a felület normálisa és a fénysugár iránya által meghatározott síkba esik, így az áthaladási sugárzás teljesen polarizált. Ezt gyakran felhasználják másfajta sugárzásoktól való megkülönböztetésére.

Az áthaladási sugárzás tulajdonságainak behatóbb vizsgálata céljából helyettesítsük be (5)-be r kifejezését a (2) képletből; így nyerjük:

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 v_z^2}{\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi \left| \frac{(n_2^2 - 1) \cos \varphi}{n_2^2 \cos \varphi + \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi}} \right|^2. \quad (6)$$

(6)-ból látható, hogy ha $\varepsilon \equiv n_2^2 \rightarrow \infty$, azaz ideális vezetőben a sugárzás energiasűrűségére

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 v_z^2}{\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi \quad (7)$$

adódik. A sugárzás olyan lesz, mint két különmemű egymással szemben v_z sebességgel mozgó e töltés találkozása esetén. Általános esetben a (6) összefüggést nyilvánvalóan a következő formában lehet felírni:

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 v_z^2}{\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi |B|^2, \quad (8)$$

$$|B|^2 = \left| \frac{(n_2^2 - 1) \cos \varphi}{n_2^2 \cos \varphi + \sqrt{n_2^2 - 1 + \cos^2 \varphi}} \right|^2, \quad (9)$$

ahol $|B|^2$ egyenlő a (6) képletben az abszolút érték négyzetével, és a közeg tulajdonságait tartalmazza. Könnyű meggyőződni arról, hogy még fémekben sem lehet egyszerűen $|B|^2 = 1$ -et venni. Valóban, (6)-ból látható, hogy ha φ értéke közel van $\pi/2$ -hez, a $|B|^2$ mennyiség φ növekedésével $\cos^2 \varphi$ -vel arányosan csökken, és $\varphi = \pi/2$ -

nél nullához tart. Könnyen belátható, hogy ez annak a következménye, hogy $(1+r) \rightarrow 0$, ha $\varphi \rightarrow \pi/2$. Így a részecske terét vákuumban kioltja tükörképének tere. Az eredmény olyan, mintha nem ellentétes, hanem megegyező töltésű részecskék találkoztak volna.

A sugárzás szögeloszlásának pontos formája természetesen n_2 értékétől függ. Kvalitatíve azonban egy egész sor fémbe és dielektrikumba hasonló jelleget mutat, 60° és 70° közé eső maximummal (lásd a 2–4. ábrákat).

Általános esetben a (6) összefüggés elemzése nem túl egyszerű, mivel fényt abszorbeáló közegekben n_2 komplex:

$$n_2 = n + ik \quad (10)$$

Hogy a tárgyalás egyszerűbb legyen, n_2^2 -ben elhanyagoljuk a képzetes részt a valós mellett. Ez a dielektrikumok többségében megtehető, mert teljesül, hogy $k \ll n$.

Egyszerűen belátható, hogy ha $\varepsilon \equiv n_2^2$ nem sokkal nagyobb, mint 1, az áthaladási sugárzás intenzitása lényegesen kisebb, mint ideális vezetőkben, mivel $|B|^2 \ll 1$ tetszés szerinti φ szögekre (lásd a (9) képletet). Valóban, ha φ kicsi és $\cos \varphi > (n^2 - 1)$, akkor

$$B^2 \approx \left(\frac{n_2^2 - 1}{n_2^2 + 1} \right)^2 < 1;$$

nagy φ szögeknél, amelyekre $\cos \varphi < (n^2 - 1)$: $B^2 \sim (n_2^2 - 1) \cos^2 \varphi$ azaz nullára csökken, amikor $\varphi \rightarrow \pi/2$.

Ha $\varepsilon \equiv n_2^2$ sokkal nagyobb, mint 1, és φ elég kicsi, B értéke közel 1, azaz a sugárzás energiasűrűsége megközelíti a (7) képletbeli értéket.

Érdekes a fémek esete, ahol általában $k \gg n$. Úgy látszik, hogy $|B|^2$ közelítő vizsgálatánál itt is néhány esetben valósnak lehet venni n_2^2 -t [6]. Valóban:

$$\varepsilon \equiv n_2^2 = (n^2 - k^2) + 2ink, \quad (11)$$

és ha k elegendően nagy n -hez képest, akkor $|n^2 - k^2| \gg |2nk|$. Itt az az érdekes, és ez fémekre jellemző, hogy ε valós része negatív. Könnyű meggyőződni róla, hogy ilyenkor nem túl nagy φ szögeknél $|B|^2 > 1$, azaz a sugárzás energiasűrűsége még annál is nagyobb, mint ideálisan vezető fémekben. Tegyük fel a közelítő tárgyalásban, hogy $n_2^2 = n^2 - k^2 < 0$. Ekkor a $|B|^2$ számlálójában álló kifejezés $|(n_2^2 - 1) \cos \varphi|^2 = [(n^2 - k^2 - 1) \cos \varphi]^2 = [(k^2 - n^2 + 1)^2 \cos^2 \varphi] > |n_2^2|^2 \cos^2 \varphi$, és $|B|^2$ -re kapjuk [6]:³

$$|B|^2 = \frac{(k^2 - n^2 + 1)^2 \cos^2 \varphi}{(k^2 - n^2)^2 \cos^2 \varphi + (k^2 - n^2) + \sin^2 \varphi}. \quad (12)$$

Ebből igen kis φ szögekre adódik:

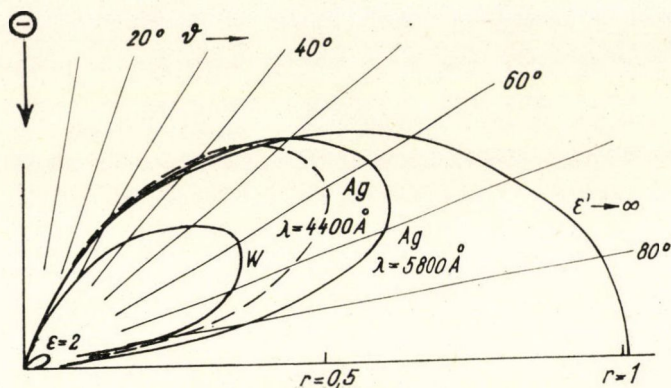
$$|B|^2 \approx 1 + \frac{1}{k^2 - n^2}. \quad (13)$$

A $|B|^2 > 1$ eset nyilvánvalóan úgy valósulhat meg, hogy ha n_2^2 negatív, a -1 össze-

³ A (9) összefüggés nevezőjében az abszolút érték négyzet kiszámításához figyelembe kell venni, hogy

$$\sqrt{n_2^2 - 1 + \cos^2 \varphi} = \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi} = i \sqrt{k^2 - n^2 + \sin^2 \varphi}.$$

adandó az $|n_2^2 - 1|^2$ tényezőben nem csökkenti, hanem növeli $|B|^2$ értékét. Másrészt összevetve az (1), (5) és (6) kifejezéseket, könnyű belátni, hogy a -1 tagot a térnek az a része adja, amely a részecskének a közegben való mozgásakor keletkezik. Így még a nagy abszorpciós együtthatójú fémekben sem lehet mindig elhanyagolni ezt a teret. Ezt a sajátyságot, amely megkülönbözteti az áthaladási sugárzást



2. ábra. Az áthaladási sugárzás intenzitásának polárdiagramja a (8) képletből számolva, ideális vezetőre ($\epsilon' \rightarrow \infty$), ezüstre, wolfrámra, és egy dielektrikumra, melyben $\epsilon = 2$.

Az ábrát Boersch és társai [13] munkájából vettük át. $r = \sin^2 \varphi |B|^2$. A görbékbl látható, hogy $\varphi < 50^\circ$ szögek esetén a sugárzás intenzitása ezüstben nagyobb az ideális vezetőben várható értéknél.

reális fémekben a (7) képlet ideális esetétől, nem látták előre az elméletből, csak annak a kísérleti eredményekkel való összevetésekor derült ki [6]. (A számolás eredményei a 2. ábrán is láthatók.) Egy másik tulajdonság, amely szintén elkerülte a figyelmet, amíg kísérletileg nem tapasztalták, abban áll, hogy a sugárzás spektrális energiasűrűsége nagyra válhat, ha $|n_2|^2$ kicsi. Éppen ez a helyzet ezüstnél az ultraibolya tartományban. Ezüstben a $\lambda = 3500 \text{ Å}$ hullámhossznál $k = 1$ és $n = 0,16$ (11. ábra). Így ϵ valós része $n^2 - k^2 \approx -1$, és a képzetes része jóval kisebb, $|2nk| = 0,32$. Következésképpen nem követünk el nagy hibát, ha $\lambda = 3500 \text{ Å}$ -re alkalmazzuk a (13) összefüggést. Ekkor azt kapjuk, hogy $|B|^2 = 2$. λ csökkenésével n_2 képzetes része csökken (az ezüst legátlátszóbb $\lambda = 3250 \text{ Å}$ -nél), a valós rész pedig nő; $\lambda = 3300 \text{ Å}$ -nél egyenlőek: $n = k = 0,4$, azaz $n^2 - k^2 = 0$. De $|B|^2$ értéke azért mégsem válik végtelenné, mint az a (13)-ból következne, mert (13) itt nem alkalmazható; n_2^2 képzetes része $|2nk| = 0,32$ ugyanis nem hanyagolható el. Ha a (9) összefüggést alkalmazzuk és figyelembe vesszük n_2^2 valós és képzetes részét is, kiderül, hogy $|B|^2$ maximuma a $\lambda = 3300 \text{ Å}$ és $\lambda = 3500 \text{ Å}$ közötti hullámhossztartományba esik (lásd a 12. ábrát).

Az összes vizsgált összefüggések akkor érvényesek, amikor a céltárgy vastagsága, amelyben a részecske mozog, jóval nagyobb, mint annak a felületi rétegnek a vastagsága, amelyből fény léphet ki. Ha a céltárgy olyan vékony, hogy mind a részecske, mind a fény keresztül tud hatolni rajta, figyelembe kell venni, hogy mindkét felületénél keletkezik áthaladási sugárzás. Ha a részecske szóródás vagy jelentős

energiavesztés nélkül halad át a céltárgyon, akkor a két felületről érkező sugárzás koherens. A megfigyelési szög, a céltárgy vastagsága és a részecske sebessége függvényében a sugárzás erősödik vagy gyengül [7–9]. Az ilyen koherencia fellépése különbözteti meg az áthaladási sugárzást mind a fékezési sugárzástól, mind a fluoreszcenciától. Ezt a jelenséget valóban megfigyelték kísérletileg is. Általános esetben, különösen ha a részecske ferdén esik be a felületre, az összefüggések eléggé bonyolultak, és ezért nem is fogjuk itt őket levezetni.

Mielőtt rátérnénk az áthaladási sugárzással kapcsolatos kísérleti eredmények áttekintésére, szeretnénk röviden tárgyalni azt relativisztikus részecske esetén. Relativisztikus részecskénél az (1) összefüggés a következő alakot ölti:

$$\frac{dW_\omega}{d\Omega} = \frac{e^2 v^2}{4\pi^2 c^3} \sin^2 \varphi \left| \frac{1}{1 - \beta \cos \varphi} + \frac{r}{1 + \beta \cos \varphi} - f \frac{1}{n_2} \frac{1}{1 - \beta n_2 \cos \varphi'} \right|^2 \quad (14)$$

Itt φ' az a szög a közegben (általában komplex), amely megfelel φ -nek a törés után. φ' -t és φ -t nyilvánvalóan a következő összefüggés kapcsolja össze:

$$n_2 \cos \varphi' = \sqrt{n_2^2 - \sin^2 \varphi}. \quad (15)$$

A (14) összefüggés arra az esetre vonatkozik, amikor a részecske a határfelület normálisa irányában mozog a közegből vákuumba, a sugárzást pedig a vákuumban a normálissal φ szöget bezáró irányban figyeljük meg. Ha a sebesség ellentétes irányú, azaz ha a részecske vákuumból halad a közegbe, β előjele minden egyes tag nevezőjében ellenkezőre változik. Tehát itt a nem-relativisztikus részecskétől eltérően a sugárzás függ a részecskéknek a közeghez viszonyított irányától, jellegzetes irányítottságot mutat. Abban az esetben, ha részecske nem a felület normálisa mentén mozog, nem lehet v -t egyszerűen v_z -vel helyettesíteni, a relativisztikus részecskénél az összefüggés ilyenkor bonyolultabbá válik [5]. Egynél nagyobb törésmutató esetén ez a képlet tartalmazza a Cserenkov–Vavilov sugárzást is. Valóban, ha n_2 értéke valós és nagyobb, mint 1, akkor a harmadik tag nevezője az ismert feltétel esetén nullává válik:

$$\cos \varphi' = 1/\beta n_2, \quad (16)$$

azaz a sugárzás energiasűrűsége végtelen nagyra válik. Komplex törésmutató esetén, azaz ha abszorpció lép fel, a sugárzás spektrális sűrűsége minden szögben véges marad.

A (14) összefüggés abban különbözik (1)-től, hogy mindegyik tagjában szerepel a relativisztikus részecske sugárzására jellemző $1/(1 \pm \beta n \cos \varphi)$ alakú tényező. Ennek eredményeként a relativisztikus részecske áthaladási sugárzásának egy sor olyan tulajdonsága van, amelyek az utóbbi években nagymértékben felhívták magukra a figyelmet, és sok elméleti kutatásra ösztönöztek [8–11]. Ezek a kérdések túllépik az előadás keretét, ezért csak egészen röviden foglalkozunk velük.

A (14) képletből látható, hogy kis φ szögek esetén, amelyekre $\cos \varphi$ közel 1, az abszolút érték négyzet első tagjának nevezője csökken a részecske energiájának növekedésével, méghozzá ugyanolyan mértékben, ahogyan β értéke közeledik 1-hez. Ettől eltérően a második tag mindig véges marad, és kisebb, mint 1. Ami a harmadik tagot illeti, ha a megfigyelési szög jelentősen különbözik a Cserenkov–Vavilov sugárzásra jellemző szögtől, és $n_2 \neq 1$, akkor az első tag mellett ezt is el

lehet hanyagolni. Ebben az esetben az áthaladási sugárzásra vonatkozó képletben igen kis szögeknél csak az első tag játszik szerepet. Ez az első tag megadja a relativisztikus részecske sugárzását, ha az hirtelen lefékeződik a vákuumban. Kis szögeknél a sugárzás erősödik, és egyidejűleg csökken a kúpszög, amelyen belül ez az erősödés jelentős méretű. Ez azt eredményezi, hogy a sugárzás integrális energiasűrűsége egységnyi frekvencia intervallumban, szög szerint a teljes tartományra integrálva, a részecske energiájával csak logaritmikusan nő. Lényeges, hogy a nem-relativisztikus részecskétől eltérően az áthaladási sugárzás kis szögeknél nem fog lecsökkenni átlászó dielektrikumokban, amelyeknek a törésmutatója nem különbözik jelentősen 1-től. Ez lehetővé teszi, hogy sok határfelületről összegezzünk sugárzást [10], ami azért érdekes, mert a relativisztikus részecske áthaladási sugárzásánál a látható tartományba eső és egy határfelületen való átlépéskor keletkező fotonok száma 0,01 nagyságrendű. Ezért az áthaladási sugárzás segítségével történő részecske detektálás hatásosságának növelésére célszerű a sugárzást sok felületről összegezni.

Később a relativisztikus részecskék áthaladási sugárzásának további tulajdonságait is tisztázták. Az itt említett sajátságok valószínűleg legérdekesebb következménye, hogy az ultra-relativisztikus részecske áthaladási sugárzásának spektruma átnyúlik a röntgen és γ -sugárzás tartományára is, annál messzebbre, minél nagyobb a részecske energiája.

Egyrészt nagyon nagy frekvenciákon a törésmutató értéke bár közel 1, mégis annál valamivel kisebb, és ez a különbség a frekvencia négyzetével arányosan csökken; másrészt minél nagyobb a részecske energiája, azaz minél kisebb $1 - \beta \cos \varphi$ kis szögeknél, a törésmutató annál kisebb eltérése 1-től elegendő ahhoz, hogy a (14) képletben a harmadik tag kicsi legyen az elsőhöz képest. Ez azt eredményezi, hogy a részecske energiájának növekedésével az áthaladási sugárzás határfrekvenciája közelítőleg az energiával arányosan nő.

Az a tény, hogy ezt nem figyelték meg azonnal, kétségtelenül annak köszönhető, hogy már megszokottá vált az az elképzelés, hogy az áthaladási sugárzás a spektrum látható tartományában jelentkezik. Amikor *Garibjan* [8] kimutatta, hogy a relativisztikus részecske áthaladási sugárzásának összenergiája a részecske energiájával arányosan nő, ez az eredmény először bizonyos mértékben paradoxnak tűnt. Hiszen a (14) formula, mint már láttuk, a részecske energiájával csak logaritmikus növekedést ad. Azonban hamarosan kiderült, hogy amint az gyakrabban előfordul, itt is egymásnak nem megfelelő mennyiségeket akartak összehasonlítani. A (14) kifejezés a sugárzás spektrális energiasűrűségét adja meg, ugyanakkor *Garibjan* eredménye a sugárzás összenergiájára vonatkozik, amely úgy nő, hogy a spektrum új frekvenciákkal gazdagodik.

Az ultra-relativisztikus részecskék sugárzásával kapcsolatban több szerző tett előzetes megállapításokat más érdekes tulajdonságokról. Többek között kimutatták, hogy a fékezési sugárzás és az áthaladási sugárzás ekkor már nem mindig tekinthetők egymástól független jelenségeknek [11]. Azt hiszem érdemes lenne ezeket a kérdéseket beható vizsgálat tárgyává tenni.

A jelen áttekintésben a spektrum optikai tartományával foglalkozom. Csak azért említettem a relativisztikus részecskék sugárzását, mert a relativisztikus részecskék alkalmazása célszerűnek látszik a látható tartományba eső sugárzás nyelésére is. Erről munkám utolsó részében fogok beszélni. Most végezzünk néhány becslést az áthaladási sugárzás intenzitására. Hogy megkapjuk az egységnyi tér-

szögben kisugárzott fotonok számát a $\Delta\omega$ frekvencia intervallumban, a (8) összefüggést el kell osztani $\hbar\omega$ -val, így kapjuk:

$$\frac{dN_\omega}{d\Omega} \Delta\omega = \frac{\alpha}{\pi^2} \beta^2 \sin^2 \varphi |B_\omega|^2 \frac{\Delta\omega}{\omega}, \quad (17)$$

ahol α -a finomstruktúra állandó, $\alpha = 1/137$, a $|B_\omega|^2$ kifejezést a (9) képlet adja nem-relativisztikus részecskénél, relativisztikus részecskénél pedig egyenlő annak a kifejezésnek az $1/4$ részével, amelyik a (14) összefüggésben az abszolút érték négyzet jellel van ellátva. A (17) képlet adja a sugárzás energiáját egy részecske esetén. Ha azonos töltésű részecskék i milliampere erősségű áramáról van szó, akkor a (17) mennyiséget még nyilvánvalóan meg kell szorozni $6 \cdot 10^{15} i$ -vel. A $|B|^2$ kifejezés viselkedését reális közegben, és az ideális vezetőtől ($|B|^2 = 1$) való eltérést a 2. ábrán lehet látni.

3. Az áthaladási sugárzás kísérleti vizsgálata

Ma már jelentős számú munka jelent meg, amelyek széles körű vizsgálatok eredményeit közlik a különböző céltárgyakban töltött részecskék hatására bekövetkező fénykibocsátásról. *Goldsmith* és *Jelley* [12] kivételével — ők 1–5 MeV energiájú protonokkal dolgoztak — mindig elektronokat alkalmaztak bombázó részecskének. A tárgyalásban nem fogom megőrizni az időrendi sorrendet, és a megjelent munkákról sem kívánok teljes áttekintést adni.⁴

Jelenleg már a következő anyagokban vizsgálták az elektronok hatására fellépő fénykibocsátást: alumínium, nikkelt, ezüst, vanádium, tantál, molibdén, titán, cézium, réz, ón, antimon, germánium [13–16]; és néhány dielektrikumban is [17]: NiO, CoO, MnO. Így elmondhatjuk, hogy a jelenség elég általánosnak bizonyult. Gyakorlatilag mindegyik munkában vizsgálták a sugárzás polarizációját, a sugárzás jellemzőinek energiafüggését, és a kisugárzott energia abszolút értékét. A sugárzás minden esetben részlegesen polarizált volt, a polarizációs irány megegyezett avval, ami az átmeneti sugárzás elméletéből adódik (az elektromos vektor a felület normálisa és a megfigyelés iránya által meghatározott síkban fekszik.) Fémek esetén a polarizáció foka nő az elektronenergia növekedésével, és gyakorlatilag eléri a 100%-ot az 50–100 keV energiatartományban. Ez megfelel a várakozásnak.

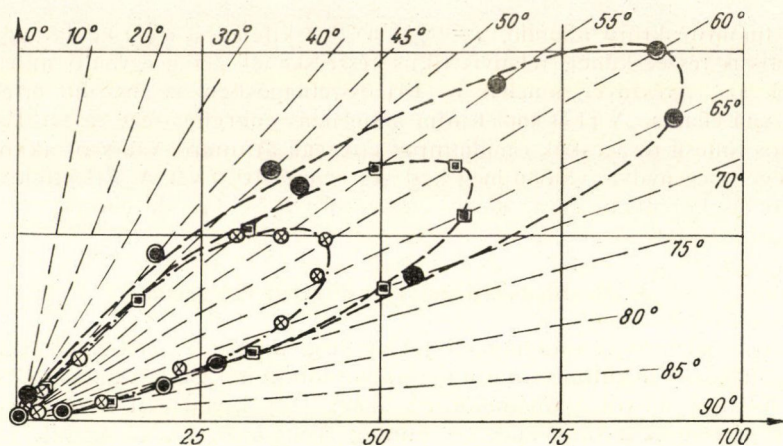
Ugyanakkor, fémekben felléphet lumineszcencia, amely a fém felületi rétegében keletkezik. Azt lehet várni, hogy a lumineszcencia intenzitása nemcsak nőni nem fog, hanem csökken az elektronenergia növekedésével, mivel a részecske ionizációs energiavesztése a felületi rétegben csökken a sebesség növekedésével.

Ugyanez történik a fékezési sugárzás látható részével is. A fékezési sugárzás az elektronok szóródásával kapcsolatos, a szórási valószínűség a vékony rétegben pedig lecsökken az elektronok energiájának növekedésével. Mivel fény a fémnek csak ebből a vékony rétegből juthat ki, a fékezési sugárzás energiájának fordított arányban kell változnia az elektronenergiával.

Ugyanakkor az áthaladási sugárzás energiája a megfigyelések szerint az elektronok sebességének négyzetével arányosan nő. Ezért az elektronenergia növekedésé-

⁴ Ennélfogva az irodalomjegyzék sem törekszik teljességre. Többek között az áthaladási sugárzás elméletével kapcsolatos kiterjedt irodalomnak is csak egy részét említem.

vel az áthaladási sugárzásnak kell döntő szerepet játszania a fékezési sugárzással és a lumineszcenciával szemben. NiO, CoO és MnO dielektrikumokban [17] a polarizáció foka kisebbnek adódik, mint fémekben; mintegy 50%-ot ér el, és gyenge elektronenergia függést mutat (a vizsgált tartomány 30 keV-ig tart). Ez egyszerűen



3. ábra. A szögeloszlásra kiszámolt értékek összehasonlítása a sugárzási spektrum látható részének polarizált komponensére kapott kísérleti adatokkal. A külső görbe ezüstre, a középső alumíniumra és a belső nikkelre vonatkozik (Sz. Mihaljak disszertációjából [14])

magyarázható avval, hogy nemcsak a dielektrikum felületén, hanem belsejében is keletkezik lumineszcencia. Mivel a látható fény abszorpciós együtthatója elég kicsi, az elektron által megtett út egyes részeiből származó fény összegeződik. Ezért a lumineszcencia és az áthaladási sugárzás energiájának közelítőleg szintén az elektronenergiával arányosan kell változnia. Ha a teljes intenzitásból levonjuk a nem poláros fény járulékát, a maradék az áthaladási sugárzásra jellemző szögeloszlást ad 60° körüli maximummal (5. ábra). Az áthaladási sugárzás elméletével jó összhangban levő eredményeket kaptak a sugárzás szögeloszlására fémekben is (3. és 4. ábra).

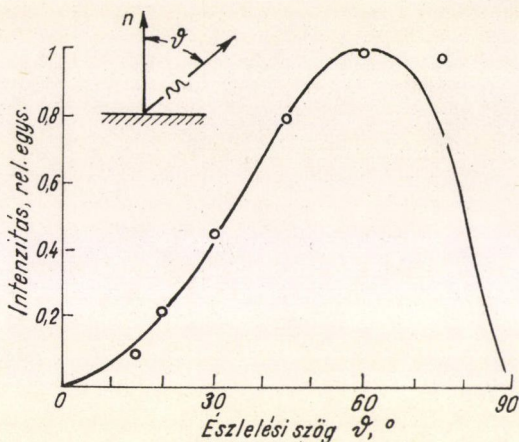
A várakozásnak megfelelően a sugárzás intenzitása arányos az elektronenergiával. A kibocsátott teljesítmény nagysága pedig a mérési hiba által megengedett határokon belül megegyezik az áthaladási sugárzás elméletéből számolt értékkel (6. ábra).

A kísérletek egész sora arra irányult, hogy a lehetséges sugárzási mechanizmusok közül néhány az áthaladási sugárzásétól különböző mechanizmust ki lehessen zárni. Így például elég megbízható módon igazolták, hogy a sugárzás energiája arányos az elektronárammal (7. ábra). Ez azt mutatja, hogy nem lépnek fel több lépést feltételező sugárzási mechanizmusok. Többek között például gázfeljődést is lehet előidézni elektronbombázás útján, és ez a gáz gerjeszthető is az elektronokkal. Egy ilyen jelenség valószínűleg kvadratikusan függne az elektronáramtól. Azt is kimutatták, hogy a sugárzás intenzitása nem függ a gáz jelenlététől [13]. Jó vákuumban (a nyomás nem nagyobb 10^{-5} torr-nál) az intenzitás nem változik, ha a vákuumot 4 nagyságrenddel megjavítjuk (10^{-9} torr-ig).

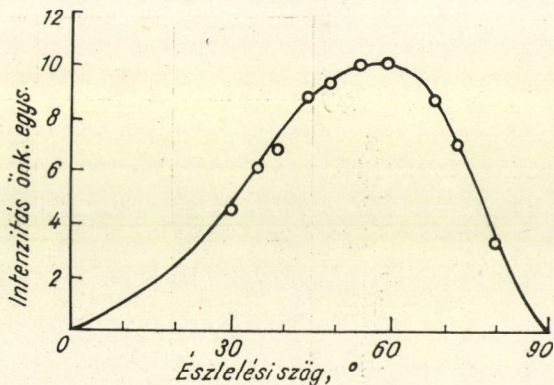
Nagyon érdekesnek tartom a különböző hőmérsékletű céltárgyakkal végrehajtott kísérleteket [13]. Ez a legközvetlenebb módszer annak a vizsgálatára, hogy a megfigyelt jelenségek kapcsolatosak-e lumineszcenciával. Wolfram esetében kimutatták, hogy a sugárzás intenzitása változatlan marad a céltárgy hevítésekor, egészen 2000°K -ig. A kísérlet

nem egyszerű, mivel ilyen magas hőmérsékleten a hőmérsékleti sugárzás igen erős, az áthaladási sugárzás pedig kis intenzitású. Úgy sikerült végrehajtani a kísérletet, hogy csak az ultraibolya tartományban átengedő színszűrőket alkalmazták, az elektronnyalábot pedig modulálták. A multiplier áramának csak a változó részét erősítve sikerült az elektronok által okozott fénykomponenst elválasztani a hőmérsékleti sugárzás folytonos háttérétől. Más fémekkel is végeztek méréseket, a hőmérsékletet minden anyagnál a megfelelő határok között változtatva [13]. Ha a fémfelületet hártya borította, hevítéskor a sugárzás intenzitása változott. Platina esetén például 400°C -on észleltek sugárzási maximumot, a polarizáció foka pedig egyidejűleg lecsökkent. Alumíniumban oxidhártya jelenlétében a sugárzás intenzitása közelítőleg lineárisan növekszik a hőmérséklettel, a polarizáció pedig gyakorlatilag megszűnik. Szeretnék arra emlékeztetni, hogy 30 évvel ezelőtt P. A. Cserenkov Sz. I. Vavilov tanácsára analóg kísérletet hajtott végre, hogy a hőmérséklet hatását az intenzitásra megvizsgálja, annak bizonyítására, hogy az általa felfedezett polarizált fénysugárzás nem lumineszcencia.

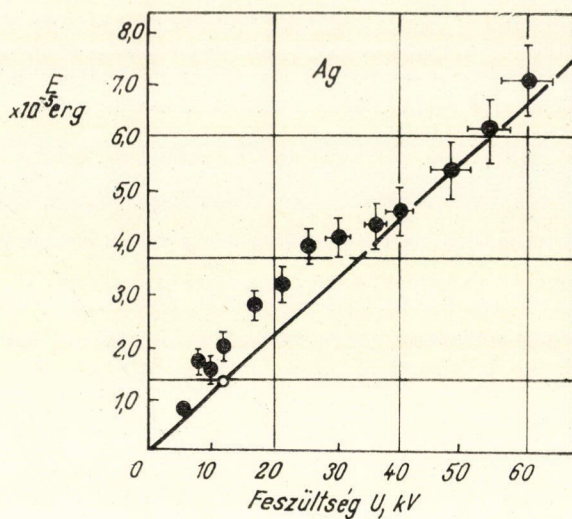
Hasonlóképpen itt is bebizonyítható, hogy a sugárzás polarizált része nem lumineszcencia. Emellett a sugárzás általános jellege, a polarizáció, a kisugárzott energia mennyisége és függése a részecske energiájától, valamint a szögeloszlása is jó egyezést mutat az áthaladási sugárzás elméletével.



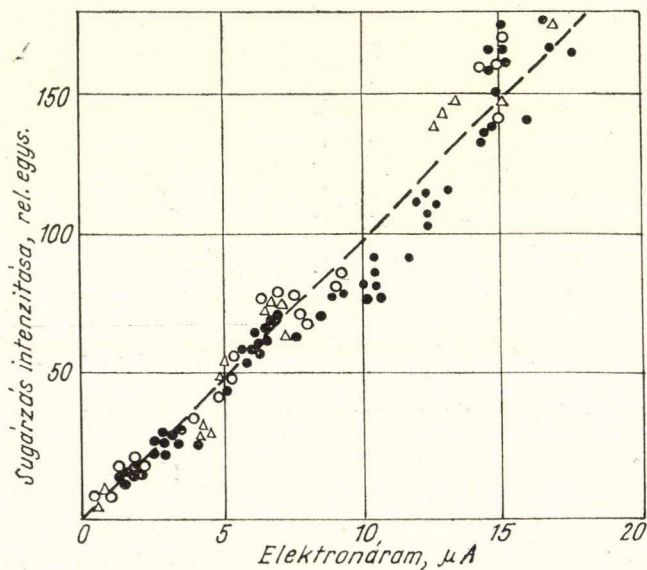
4. ábra. A megfigyelt és az elmélet alapján kapott szögeloszlás összehasonlítása wolframban. (Boersch és társai [13] adatai).



5. ábra. Dielektrikum ($\epsilon = 5,4$) elektronokkal való bombázásakor keletkező sugárzás polarizált részének szögeloszlása. A folytonos görbe az áthaladási sugárzás elmélete alapján megállapított görbe. (S. Tanaka és J. Katayama [17] eredményei)



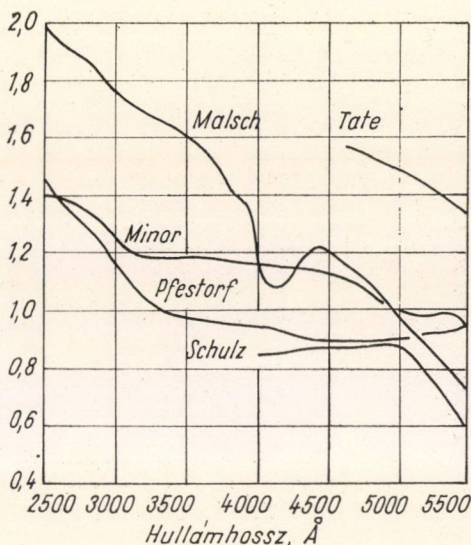
6. ábra. Az áthaladási sugárzás energiájának függése az elektronenergiától, $E = f(U)$, ezüst esetén, ($\varphi = 60^\circ$ szögben, $\Omega = 7,7 \cdot 10^{-2}$ térszögben, 3900–6600 Å hullámhossztartományban, az áramerősség $I \mu\text{A}$ -ben, elektronenergia keV-ben), összehasonlítva az elmélettel (egyenes). (Sz. Mihajlak [14] disszertációjából)



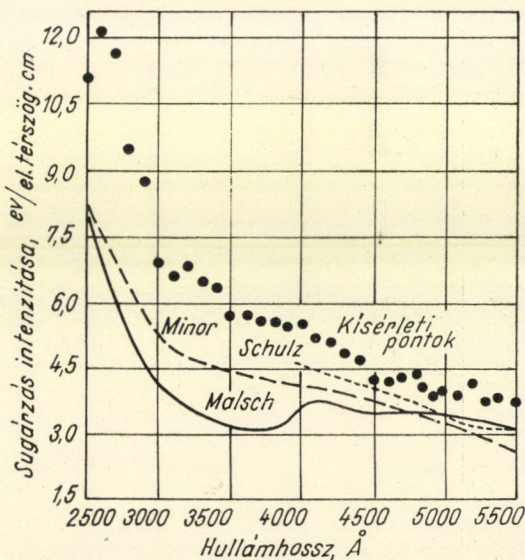
7. ábra. Az áthaladási sugárzás intenzitásának (relatív egységekben) függése az áramerősségtől (12 keV energiánál) (Sz. Mihajlak [14] disszertációjából)

Érdekes az áthaladási sugárzás színképének kísérleti vizsgálata is. Evvel a kérdéssel kicsit részletesebben szeretnék foglalkozni. Hogy a megfigyelt spektrumot az elmélettel összevethessük, ismernünk kell a törésmutató valós és képzetes részét a frekvencia függvényében. Ez nem mindig egyszerű. Nézzük például a réz törésmutatójának valós részét a hullámhossz függvényében különböző szerzők mérései alapján (8. ábra). A görbékől látható, hogy a különböző szerzők mérései között gyakorlatilag semmi egyezés sincs. Ez nyilván nagyrészt annak a következménye, hogy a fém maga nem volt azonos minőségű, amelyen a méréseket végezték. A törésmutató képzetes részére kapott adatok egyezése valamivel jobb, de azért az sem mondható kielégítőnek. A réz áthaladási sugárzására vonatkozó kísérleti adatokat a 9. ábrán tüntettük fel, $\varphi = 30^\circ$ és 100 keV energiájú elektronok esetén, és felrajzoltuk a már említett optikai adatokból számolt görbéket is. Ha figyelembe vesszük a lehetséges hibákat, egy esetben sem adódik elmentmondás az elmélettel. Azonkívül ha nemcsak a görbék menetét hasonlítjuk össze, hanem az ordináta abszolút értékeit is, ez még meggyőzőbbé teszi az egyezést. Itt természetesen olyan kísérlet lenne döntő, amelyben különböző céltárgyakban egymással párhuzamosan mérnék az optikai tulajdonságokat és az áthaladási sugárzás jellemzőit. Bár már eddig is több fizikust foglalkoztattak ezek a kérdések, mindaddig részben tisztázatlanok maradnak, amíg az áthaladási sugárzás fel nem kelti az optikusok érdeklődését.

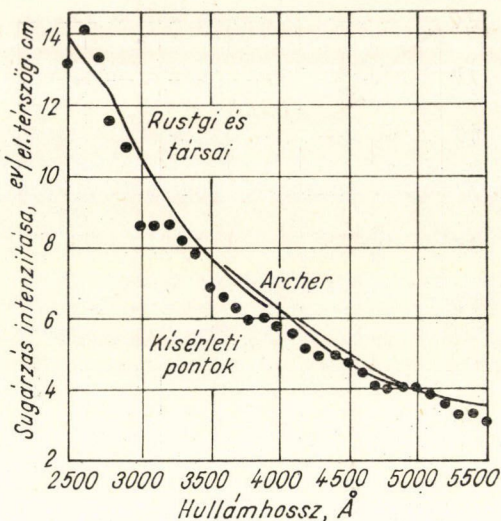
Bár réznél az áthaladási sugárzás elméletének alkalmazhatósága



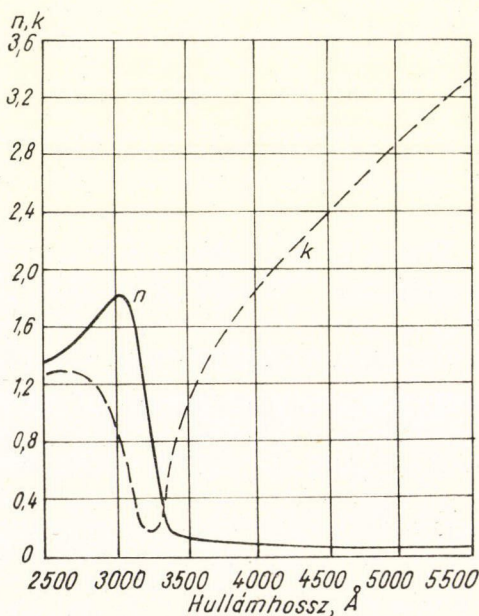
8. ábra. A réz törésmutatója valós részének hullámhossz függése különböző szerzők mérései szerint. (Emerson és társai [15] munkájából átvett ábra.)



9. ábra. A kísérletileg kapott foton-intenzitás a hullámhossz függvényében réz esetén (pontok) összehasonlítva az elméleti görbével. Elektronenergia 100 keV, a rézfólia vastagsága 1270 Å, a megfigyelési szög $\varphi = 30^\circ$. (Emerson és társai [15].)



10. ábra. A kísérletileg kapott foton-intenzitás a hullámhossz függvényében germánium esetén (pontok) összehasonlítva az elméleti görbével. Elektronenergia 100 keV, fólia vastagság 690 Å, megfigyelési szög $\varphi = 30^\circ$. (Emerson és társai [15]).



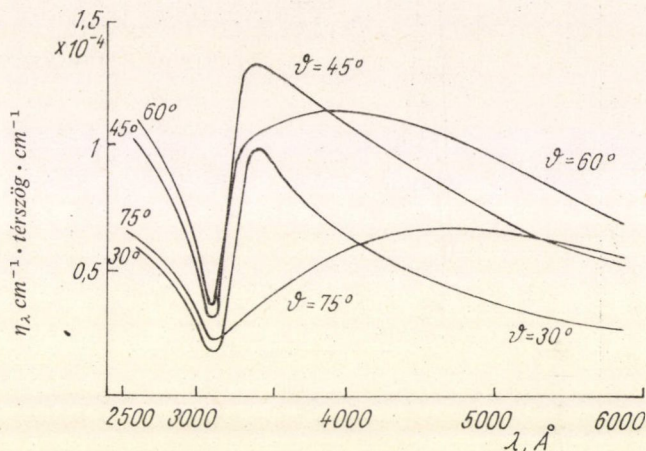
11. ábra. Az ezüst törésmutatója valós n és képzetes k részének hullámhossz függése. (A [15]-ből átvett ábra.)

a sugárzás színeképének magyarázatára nem látszik teljesen nyilvánvalónak, más anyagokban ez jóval meggyőzőbb. A következő ábrán (10. ábra) láthatók az áthaladási sugárzás spektrumára kapott kísérleti adatok germániumon, és a rendelkezésre álló optikai adatokból számolt elméleti görbék [15]. Látható, hogy itt sokkal jobb az egyezés.

Az elmélet alátámasztása céljából természetesen érdekes az az eset, amikor a törésmutató menetében olyan sajátosságok lépnek fel, amelyeknek jellemző módon kell megmutatkoznuk az áthaladási sugárzás spektrumában is. Ebből a szempontból kétségtelenül fontosak azok a mérések, amelyeket több szerző végzett ezüstön. A törésmutató valós (n) és képzetes részének (k) menete a 11. ábrán látható. Minden az ezüst belsejéből jövő sugárzásnál a legkedvezőbbek azok a hullámhosszak, amelyekre az ezüst a legátlátszóbb ($\lambda = 3250$ Å). Az áthaladási sugárzás maximumának, mint azt már tárgyaltuk, kicsit nagyobb hullámhossznál kell lennie, ahol a törésmutató valós része kicsi, és a képzetes sem nagy még. A 12. ábrán láthatók az ezüstre kiszámolt sugárzási spektrumok. Ezeket a görbéket a már idézett német szerzők munkájából vettük át [13]. Ugyanilyen görbéket számolt ki tőlük függetlenül *Parijszkaja* nálunk. A várakozásnak megfelelően az általa számolt görbék jól egyeznek az előzőekkel.

A 12. ábrából látható, hogy itt az áthaladási sugárzás spektrumának egészen sajátos képet kell mutatnia. A hullámhossz csökkentésekor $\lambda = 3450$ Å-nél maximumot ér el, azután élesen levág abban a tartományban, ahol az ezüst átlátszó. Emellett kis szögeknél például $\varphi = 30^\circ$ értéknél a sugárzási maximum elég éles. 60° -os szög-nél a sugárzás intenzitása megnő (ez, mint már láttuk, jellemző az átha-

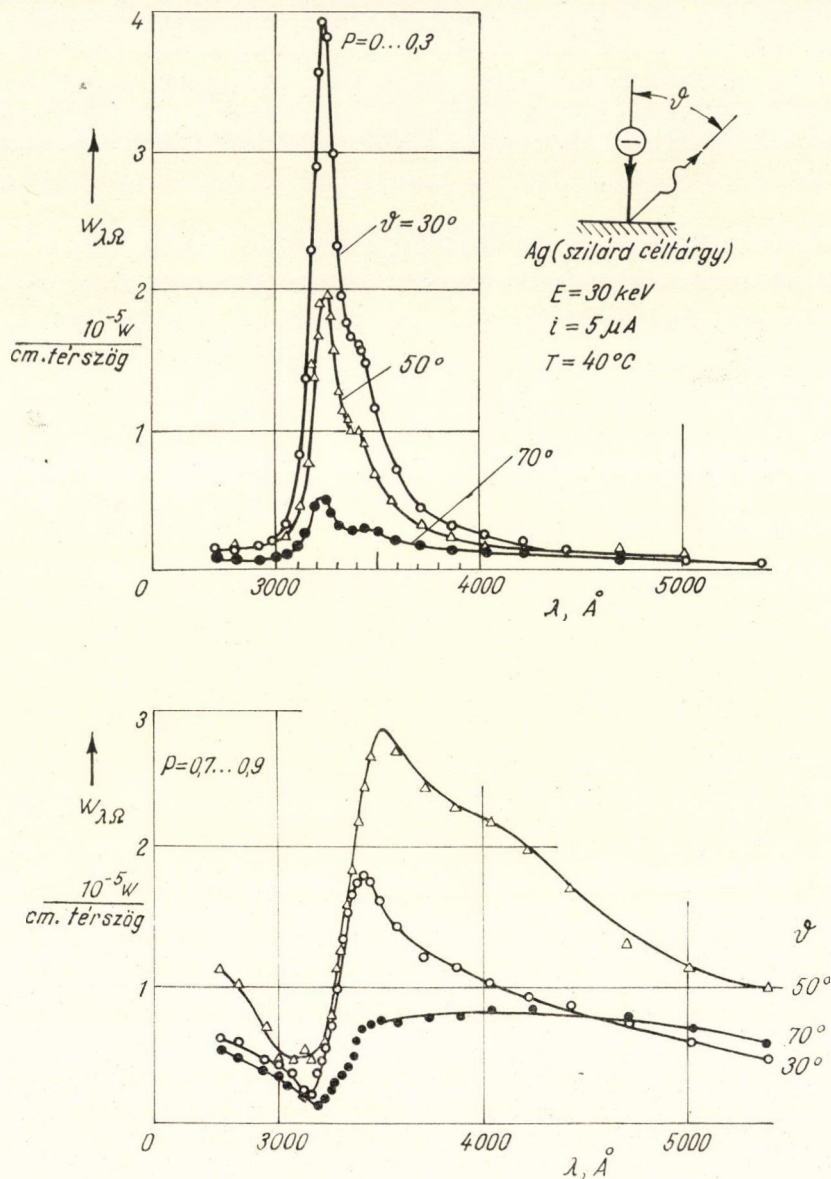
ladási sugárzásra,) de a maximum laposabbá válik. Még nagyobb szögeknél ($\varphi = 75^\circ$) az intenzitás csökken és a maximum eltűnik. Ezeket a sajátságokat kísérletileg is megfigyelték. A német kutatók [13] a következő módon jártak el. Megmérve a sugárzás energiasűrűségét a céltárgyat bombázó elektronok energiájának függvényében, a szerzők a kapott eredményt két tag összegeként értelmezték: az első egyenesen arányos az elektronenergiával, a második pedig fordítottan arányos. Ennek a felbontásnak az eredménye a 13. ábrán látható, 30 keV elektronenergiánál.



12. ábra. Az áthaladási sugárzás várható spektruma ezüstben a törésmutató adatok alapján különböző észlelési szögeknél. (Boersch és társai [13] adatai).

A rajzból látható, hogy annak a résznek a spektruma, amelyik az elektronenergiával arányosan változik, valóban megegyezik az áthaladási sugárzás elméletéből számított görbével. A növekvő elektronenergiával csökkenő rész egy keskeny csúcs formájú a 3250 Å hullámhossznál, azaz ahol az ezüst legátlátszóbb. A szerzők feltételezik, hogy ez a sugárzás valószínűleg az ezüst belsejében keletkező fékezési sugárzás optikai tartományba eső része. 30 keV energiánál ennek a csúcsnak a maximuma közelítőleg egyenlő értékű az áthaladási sugárzás intenzitásával a maximumhelyen. 100 keV energiánál már egy nagyságrenddel kisebbnek kell lennie és így el lehet hanyagolni.

Az ezüstréteg vastagsága, amelyből a fény kiléphet, nem nagy. Még annál a hullámhossznál is, amelyre legátlátszóbb az ezüst, a fényintenzitás e -ed részére csökken 3500 Å körüli rétegvastagságnál. Azonban vékony fóliákban megfigyelhető a mindkét felületen (azaz az elektronok belépésekor a fóliába, és az abból való kilépéskor) keletkező áthaladási sugárzás interferenciája révén fellépő sugárzás. Az interferencia azt eredményezi, hogy meghatározott szögeknél és fólia vastagságoknál a sugárzás intenzitásában maximumoknak és minimumoknak kell fellépniük. Ez valóban meg is történik [18]. A következő, 14. ábrán az áthaladási sugárzás spektrumát ábrázoltuk ezüstről 100 keV elektronenergia esetén. A sugárzás észlelési szöge 30° és a fólia vastagsága 710 Å. Ez közelítőleg megfelel a két felületről jövő



13. ábra. Az ezüstben elektronbombázás hatására kapott sugárzási spektrum felbontása két komponensre azon feltételezés alapján, hogy az intenzitás minden hullámhossznál két tag összege: egyik egyenesen, másik fordítottan arányos az E elektronenergiával (A [13] munkából). A felső ábrán az $1/E$ -vel arányos komponens, az alsón az E -vel arányos. A felbontást különböző észlelési szögekre és $E = 30 \text{ keV}$ elektronenergiánál végezték.

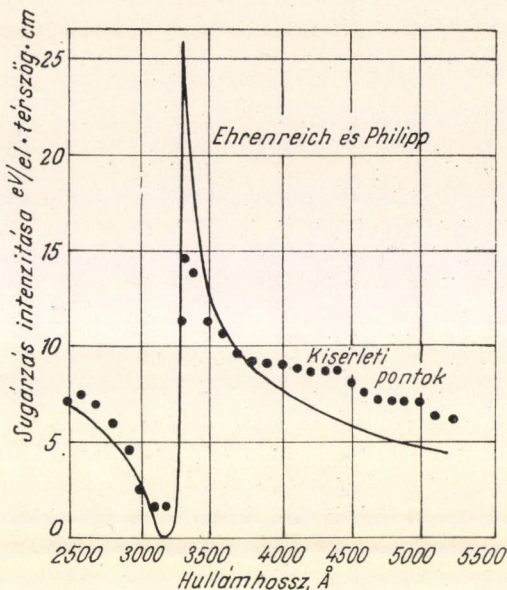
sugárzás amplitúdóinak összegéből kialakuló maximumnak. Az ábrából látható, hogy a várt sugárzási maximum (a folytonos görbe) valóban kiadódott. A kísérleti eredmények pontjai elég jól illeszkednek a számolt görbére, bár a kísérletileg kapott csúcs a vártnál valamivel kisebb és laposabb. Összegezve az említetteket, azt lehet mondani, hogy az áthaladási sugárzás elmélete elég jónak bizonyul a sugárzás spektrumának magyarázatára is, és az ezüstön kapott kísérleti eredmények valószínűleg a legmeggyőzőbb módon tanúskodnak erről.

Az ezüstön kapott eredmények továbbbi megfontolások és vita tárgyát képezték. Arról van ugyanis szó, hogy a vékony ezüstrétegek által kibocsátott sugárzás vizsgálatára vállalkozó fizikusok [18] szemmel láthatóan nem tudtak az áthaladási sugárzás elméletének létezéséről. Ők *Ferrell*nek azokból az 1958-ból származó elképzeléseiből indultak ki, amelyek szerint a fémbe kimutathatók az elektron-plazma rezgései, amelyet a fémbe áthaladó gyors elektron gerjeszt [20, 21]. Ezért a sugárzási maximum felfedezését és a lemezvastagságtól való függését is ezen elképzelések bizonyítékaként értelmezték. Manapság a „plazma” szónak mágikus hatása van a fizikusok elméjére. Ha csak egyszerűen áthaladási sugárzásról lett volna szó, és nem plazma rezgésekkel kapcsolatos kutatási törekvésekről, lehetséges, hogy bele sem fogtak volna a munkába.

Szilin és Fetiszov [22] mutatták ki először, hogy az USA-ban kapott eredmények jól beillenek az áthaladási sugárzás elméletébe, ha *Pafomov* [7] formuláját vékony lemezek esetére alkalmazzák. Ebben az időben már megvoltak *Mihaljak* kísérleti eredményei ezüstben nagyobb hullámhosszú sugárzásra. Nyilvánvaló volt, hogy a rövidebb hullámhosszak tartományában is létre kell jönnie az áthaladási sugárzásnak. Ezért volt lényeges az elmélettel való egyezés rövidebb hullámhosszak és vékony lemezek esetén.

Azonban helytelen lenne azt gondolni, hogy választani kell az áthaladási sugárzás és a *Ferrell*-féle mechanizmus között. Az áthaladási sugárzás elmélete makroszkopikus elmélet, ugyanakkor *Ferrell* egy mikro-folyamatot vizsgál. Ez a folyamat kisebb vagy nagyobb mértékben meghatározó szerepet játszhat a fém azon optikai jellemzőinek a kialakításában, amelyek azután a makroszkopikus elméletben is szerepelnek. Ugyanakkor az áthaladási sugárzás elméleténél is teljes mértékben figyelembe vesszük ezt a folyamatot.

A sugárzásnak a részecske terével koherens részéről a következőket mondtam 1961-ben abban az előadásban, amelyben *Sz. I. Vavilov*ról emlékeztem meg [23]:



14. ábra. Az elméletileg várt és kísérletileg mért foton-intenzitás 710 Å vastagságú ezüstoffliából 30° megfigyelési szögben és 100 keV elektronenergiánál. (*Emerson és társai* [15].)

„Most kimondhatjuk: az interferencia fellépése arra mutat, hogy a sugárzást a mozgó részecske elektromágneses tere határozza meg. Ezt a teret a közegre felírt Maxwell-egyenleteknek le kell írniuk, ha helyesen írjuk fel őket erre az adott esetre. Így az áthaladási sugárzás elmélete nem más, mint a Maxwell-egyenletek egyszerű következménye, és ha a kísérleti körülményeket helyesen vesszük számításba, ennek az elméletnek a megfigyelt sugárzás teljes leírását kell adnia. Az elméletnek tartalmaznia kell mindenféle különleges feltevésen alapuló jelenségeket is (kivéve persze a lumineszcenciát). Ha az elmélet és kísérlet részletesebb összehasonlítása eltéréseket eredményez, ez nyilván azt fogja jelenteni, hogy az ezüstben a fény terjedésére felírt egyenletek javításra szorulnak. Más szóval, az ilyen fajta kutatás nem más, mint a vékony ezüstrétegek optikai tulajdonságainak feltárása.”

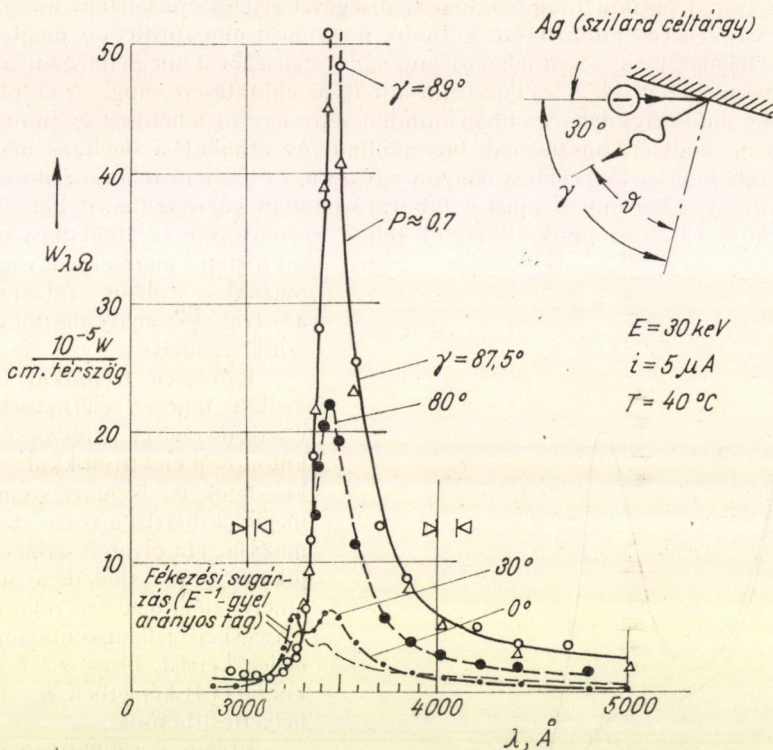
Itt éppen az utolsó mondatra szeretném felhívni a figyelmet: az optikai állandók mérésének lehetőségére. Sajnos az általam kifejtett megállapítások nyilván nem váltották ki az amerikai kollégák meglepedését. A leközölt előadásomat egy fordítói jegyzettel látták el (ez elég szokatlan folyóiratban közölt cikkeknel). Ez a jegyzet a probléma *Stern*-féle [21] levezetését tartalmazza. *Stern* kimutatja, hogy ezüstben a kísérlettel összhangban meg lehet kapni a sugárzási maximumot az áthaladási sugárzás elmélete alapján, de plazma rezgésekkel kapcsolatos elképzelések alapján is, azaz „ez csak két különböző mód ugyanazon jelenség leírására. Mivel az áthaladási sugárzáson alapuló számolás a vékony rétegből jövő sugárzást teljes egészében értelmezi, ez általánosabb. *Ferrell* módszere csak a szóban forgó csúcra ad jó eredményt, és értelmezi a csúcs létrejöttének fizikai mechanizmusát.” Ez a megállapítás inkább igazolja, mint cáfolja az én véleményemet, és semmi esetre sem ad okot vitára. Ha jól értem, lényegében csak kiegészítő bizonyítékot kapunk arról, hogy az adott csúcsnál döntő módon a plazma rezgések határozzák meg a törésmutató viselkedését, és a szomszédos hullámhossztartományokban a mikroszkopikus elmélet még nem képes megadni a törésmutató frekvencia függését.

A törésmutató viselkedését az határozza meg, hogy az anyagnak van egy rezgési sajátfrekvenciája. Az ilyen sajátrezgések mechanizmusa sok esetben nem azonos a plazma rezgések mechanizmusával. A dielektrikumokban végzett kísérletek részben ennek a kérdésnek a tisztázását is szolgálták [17]. Szerintem a főkérdés annak a megállapítása, hogy az áthaladási sugárzás segítségével mennyiben lehet az anyag belsejében lejátszódó mikroszkopikus folyamatokat meghatározni.

Az áthaladási sugárzás elmélete csak olyan komplex törésmutató adatokat használ fel, amelyeket eddig optikai mérésekből határoztak meg. Evvel kapcsolatban felmerül a kérdés: ekvivalens-e az áthaladási sugárzással kapcsolatos megfigyelésekből adódó információ az optikai módszerekkel meghatározott törésmutató értékekből kapott információval? Az áthaladási sugárzás szinképéről, intenzitásáról nyert kutatási eredmények, amelyeket ebben az előadásban foglaltam össze, azt mutatják, hogy legalábbis első közelítésben valóban ekvivalensnek tekinthetők a kapott adatok. Hogy milyen pontos az egyezés, azt a további kísérletek fogják eldönteni.

A másik, szintén tisztázandó probléma abban áll, hogy lehetséges-e az áthaladási sugárzással olyan tulajdonságait meghatározni egy közegnek, amelyek annak csak vékony felületi rétegét jellemzik, nem pedig az egészre vonatkozó átlagértékeket. Evvel kapcsolatban fel szeretném hívni a figyelmet német kutatók nemrégiben kapott érdekes eredményeire [19], akik a már említett sugárzási maximumot vizsgálták ezüstben, a bombázó elektronokat nagyon kis szögben — egészen 1° -ig — ejtve a fémfelületre. (A maximális elektronenergia 30 keV volt.) Kiderült, hogy ebben

az esetben a csúcs közelítőleg egy nagyságrenddel megnőtt és nem esett egybe avval a hullámhosszal, ahol az ezüst a legátlátszóbb (15. ábra). Azt a következtetést vonták le ebből, hogy a sugárzás az elektronok által gerjesztett felületi plazma hullámok eredménye. Szerintem ez a következtetés még további megfontolásokat kíván.



15. ábra. Az ezüst sugárzása ferde elektronbeesés esetén.

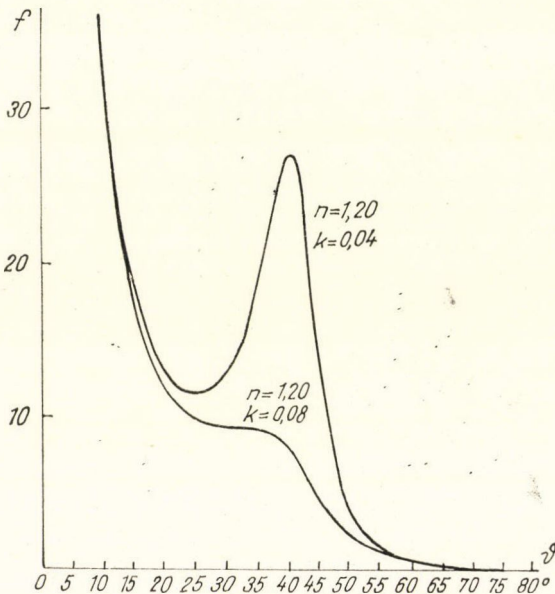
A normálissal $87,5^\circ$ és 89° -ot bezáró beesési szögeknél 30 keV elektronenergiánál a csúcs magassága egy nagyságrenddel felülmúlja a fékezési és áthaladási sugárzás intenzitását normális irányú beesésnél. (A [19] munka adatai).

Ha az elektron egész útja során a felületi rétegben maradna, akkor nagyon kedvezőek lennének a körülmények a fékezési sugárzás látható tartományába eső részének a megfigyelésére, mivel a fény az elektron egész útjáról összegeződne. Így az elektronenergia növekedésével nőne a fényintenzitás és végeredményben lehetne egy nagyságrenddel nagyobb, mint merőleges beesés esetén.

Azonban fékezési sugárzás az elektron szóródásakor keletkezik, amikor az elektron a közeg mélyébe kerülhet, vagy ki is jöhet belőle, a felületen keresztül, visszafelé. Világos, hogy ez nem egyszerűen tárgyalható eset, és szerintem gondos elemzéssel kell eldönteni, hogy alkalmazható-e itt is az áthaladási sugárzás elmélete.

4. A relativisztikus részecskék látható tartományba eső áthaladási sugárzásának jellemzői

Mint már láttuk, nem-relativisztikus részecskék esetén a kísérleti eredmények összhangban vannak az áthaladási sugárzás elméletével (kivéve talán azt a még nem világos esetet, ha a részecske a felület mentén sűrűlő beeséssel érkezik). Mindaddig az anyag ismert optikai tulajdonságai segítségével értelmezni lehetett az áthaladási sugárzás színeképét és intenzitását. Látható, hogy most már fordítva is megfogalmazhatjuk a feladatot — az áthaladási sugárzás segítségével meghatározni az anyag optikai paramétereit. Nem vállalkozom annak az eldöntésére, hogy ez előnyösebb-e a szokásos módszereknél. Azonban mindenesetre egy új lehetőség és mint minden független új módszer, hasznosnak bizonyulhat. Az áthaladási sugárzás megfigyelésével végzett kísérlet lényegében nagyon egyszerű, és ha nem relativisztikus elektronokról van szó, bármilyen optikai laboratóriumban végrehajtható. Felesleges azt kutatni, hogy vajon az optikai mérések teljesen azonosak-e az áthaladási sugárzással történő mérésekkel, vagy tartalmaznak-e olyan információkat, amelyek bizonyos mértékig kiegészítik egymást.



16. ábra. Relativisztikus részecske áthaladási sugárzásának szögeloszlása $\theta < 90^\circ$ szögekre, a törésmutató két értékénél: $n=1,20$, $k=0,04$ és $n=1,20$, $k=0,08$.

$$f = \frac{|1 - \varepsilon|^2 |\varepsilon - \sin^2 \theta| \operatorname{ctg}^2 \theta}{|(\sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta} + \varepsilon \cos \theta)(1 - \sqrt{\varepsilon - \sin^2 \theta})|^2}$$

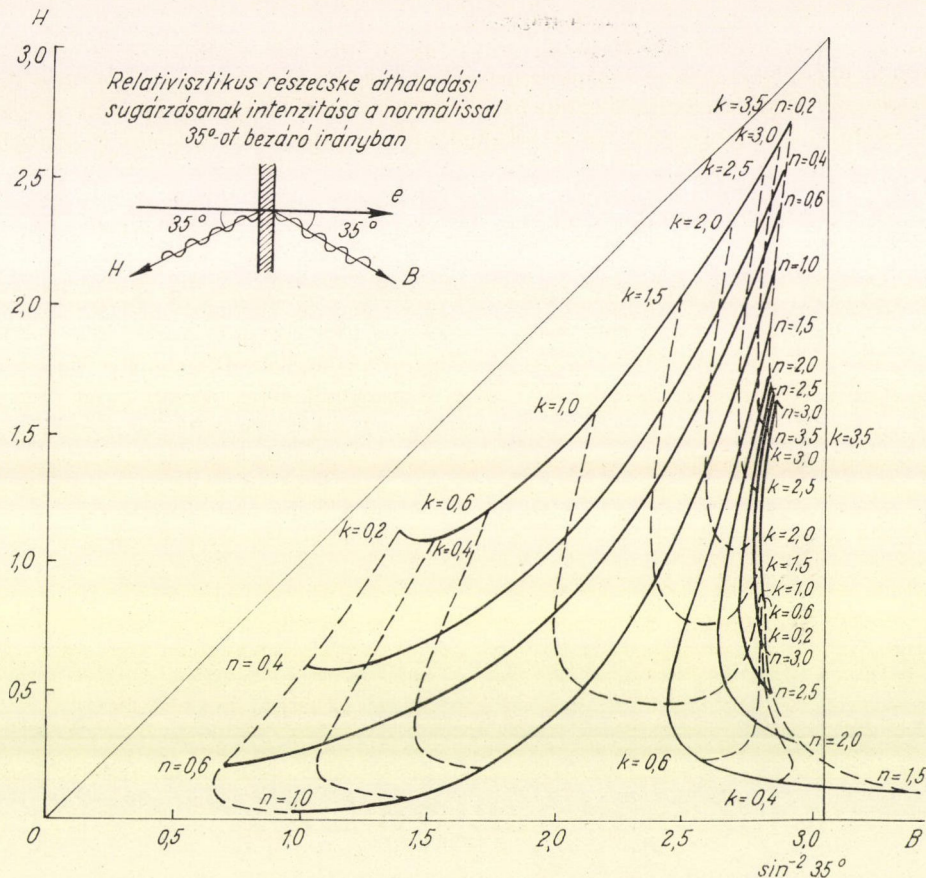
$$\varepsilon = (n + ik)^2$$

az energiaveszteségek az anyag felületi rétegében. Ez lehetővé teszi a sugárzás megfelelőbb vizsgálatát, beleértve a részecskének a céltárgyból való kirepülésekor keletkező sugárzást is, mivel a céltárgy vastagabb lehet, mint kisebb energiájú részecskék esetén.

Korszerű technikai feltételek mellett teljesen elérhetőek relativisztikus energiájú részecskékkel — különösen elektronokkal — végzett kísérletek is. Néhány szempontból megfelelőbb ilyen részecskék alkalmazása. Ha olyan θ szögben figyeljük meg az áthaladási sugárzást, amely elég nagy a relativisztikus részecskére jellemző maximum szögehez képest, azaz $\theta \gg E/mc^2$, akkor a (14) képletben $\beta = 1$ értéket helyettesíthetünk.

Ebben a szögtartományban a sugárzás szögeloszlása és spektrális energiasűrűsége nem függ a részecske energiájától. Emellett még a sugárzás észlelésére a kísérleti feltételek is bizonyos értelemben egyszerűbbé válnak. Mindenekelőtt a sugárzás intenzitása $1/\beta^2$ -szerecsére nő. Egy 20 keV energiájú elektronnal összehasonlítva ($\beta = 0,2$) ez egy 25 értékű szorzótényezőt jelent. Azonkívül ebben az esetben nem játszik nagy szerepet a szóródás és

Evvel kapcsolatban szeretnék néhány számítási eredményt ismertetni, amelyeket a legutóbbi időkben kaptunk *Pafomovval* [25]. Aránylag átlátszó anyagokban a törésmutató és az abszorpciós állandó mérése nem jár különösebb nehézségekkel. Ezért csak olyan anyagokról beszélünk a következőkben, amelyekben a fény elnyelődik a hullámhossz nem nagyszámú többszörösének megfelelő úton. Ha nem nagyon nagy az abszorpció, akkor a Cserenkov—Vavilov jelenség adhat felvilágo-



17. ábra. Az abszcissa tengelyen az áthaladási sugárzás intenzitásának várható értékét tüntettük fel 35° szögben (a részecske haladási irányához képest), az ordináta tengelyen pedig $\pi - 35^\circ$ szögben. A folytonos görbék az n = állandó és változó k értékekre, a szaggatott görbék állandó k és változó n értékekre vonatkoznak

sítást az anyag optikai jellemzőiről. Amint már láttuk, ez a (14) összefüggésből automatikusan kiadódik.

A 16. ábrán látható az áthaladási sugárzás szögeloszlása a részecske mozgási irányával hegyesszöget bezáró szögtartományban. A felső görbén világosan látható a Cserenkov—Vavilov sugárzásra jellemző maximum. Ezt a görbét a törésmutató

valós részének $n = 1,20$ értékével és képzetes részének $k = 0,04$ értékével számoltuk. k ilyen értéke mellett a fényintenzitás 4λ úton csökken e -ed részére, ahol λ a fény hullámhossza vákuumban, azaz látható fényre közel 2μ vastagságban. Ily módon a fény abszorpciója már itt sem túl kicsi. Az alsó görbét a törésmutató képzetes részének kétszeres értékére számoltuk: $k = 0,08$. Látható, hogy itt már majdnem teljesen eltűnt a maximum. Ebből következik, hogy már kvalitatíve a maximum méreteiből meg lehet becsülni az abszorpciós együttható nagyságrendjét, ha az nem túl nagy. Világos, hogy a maximum nagysága és elmosódottságának mértéke a közeg abszorpciós együtthatójától függ, a maximum helye pedig elsősorban a törésmutató valós részétől. Azonban meg kell jegyezni, hogy nagy n értékek esetén a Cserenkov—Vavilov sugárzás fénye nem jut ki a közegből még kis abszorpció esetén sem, belső teljes visszaverődés miatt. Ez könnyen kiküszöbölhető, ha a részecske nem normális irányban szeli át a közeg határát, hanem avval szöget bezáróan ejtjük be. A (14) összefüggést akkor egy bonyolultabb kifejezéssel kell helyettesíteni, de ha a szögeloszlási görbét számológéppel számoljuk, ez nem nagyon lényeges.

Felmerül a kérdés, hogy lehetséges-e erősen abszorbeáló közegek, például fémek optikai jellemzőit egyszerűen mérni. Valószínűleg különböző kísérleti elrendezéseket lehet tervezni erre a célra. Ezek közül csak egyet szeretnék ismertetni, amelyre Pafomovval az áthaladási sugárzás szögeloszlási görbéinek elemzésekor figyeltünk fel. A részecske haladási irányával (a felület normálisa menti részecske beesés esetén) φ szöget bezáró irányban vizsgálva az intenzitást, az nemcsak függ a törésmutató valós és képzetes részétől, de egészen különbözően függ, ha φ hegyesszög és ha φ tompaszög. Ez a következő (17.) ábrán látható. A B betű jelöli a sugárzás intenzitását a $\varphi = 35^\circ$ hegyesszög alatt, a H betű pedig a $\pi - 35^\circ$ szög alatt, ahogy a rajzon is látható. A koordináta-rendszer abszcissza tengelyén a B , ordináta tengelyén pedig H értékeit tüntettük fel. A folytonos görbék adott n értékeknek felelnek meg, miközben k változik, a szaggatott görbék pedig adott k -nak, változó n értékekkel. Láthatjuk, hogy két görbesereget kapunk, és egyik görbe-sorozat görbéi sem metszik külön-külön egymást. Ennélfogva az ábra minden egyes pontja megfelel a törésmutató valós és képzetes része egy-egy értékének. Ez azt jelenti, hogy adott elektron-áram esetén az áthaladási sugárzás intenzitását különböző hegyes- és tompaszögek alatt tetszés szerinti hullámhosszon mérve, egy etalonnal való összehasonlítás segítségével közvetlenül megállapíthatóak az anyag optikai jellemzőinek értékei. Most nehéz lenne megmondani, hogy a gyakorlatban megfelelő lenne-e ez a módszer. Azonban, mivel a relativisztikus részecskék áthaladási sugárzását még szinte nem tanulmányozták⁵, legalábbis remélni lehet, hogy ilyen jellegű ábrák hasznosnak bizonyulnak a kísérleti adatoknak az elmélettel való összehasonlítására.

Arra törekedtem, hogy vázoljam az áthaladási sugárzás kérdésének jelenlegi helyzetét. Nagyon nehéz előre megjósolni, hogy egy jelenség a jövőben milyen alkalmazásra fog lelni, azonban véleményem szerint az áthaladási sugárzással kapcsolatos kutatások már olyan fázisba jutottak, hogy ezzel is kell foglalkoznunk.

⁵ Néhány adat található a [24] munkában.

IRODALOM

1. P. A. Cserenkov, ДАН СССР 8, 451, 1934; Sz. I. Vavilov, ДАН СССР 8, 457, 1934.
2. I. M. Frank, Изв. АН СССР, Сер. физ. 6, 3, 1942.
3. V. L. Ginzburg—I. M. Frank, ЖЭТФ, 16, 15, 1946.
4. J. E. Lilienfeld, Phys. Zs. 20, 280, 1919.
5. V. E. Pafomov, Радиофизика, 5 (3), 485, 1962.
6. St. Michalak—V. E. Pafomov, Z. N. Univ. Łódz. (N. mat.-przyrodnicze), Ser. II., 53, 1964.
7. V. E. Pafomov, ЖЭТФ, 33, 1074, 1957.
8. G. M. Garibjan, ЖЭТФ, 37, 527, 1959; K. A. Barszukov, ЖЭТФ, 37, 1106, 1959.
9. R. H. Ritchie—B. Eldridge, Phys. Rev. 126, 1935, 1962.
10. I. M. Frank, Nobel-előadás, УФН, 48, 337, 1959; Science 131, 702, 1960.
11. G. M. Garibjan,—I. J. Pomerancsuk, ЖЭТФ, 37, 1828, 1928; G. M. Garibjan, ЖЭТФ, 39, 333, 1960; V. E. Pafomov, ДАН СССР, 133, 1315, 1960; I. I. Goldman ЖЭТФ, 39, 332, 1960; F. F. Ternovszkij, ЖЭТФ, 39, 171, 1960; V. E. Pafomov, ЖЭТФ, 47, 530, 1964.
12. P. Goldsmith—J. V. Jelley, Phil. Mag. 4, 836, 1959.
13. H. Boersch, C. Radeloff, G. Sauerbrey, Zs. Phys. 165, 464, 1961.
14. Sz. Mihaljak, disszertáció (МГУ, 1961)
15. L. C. Emerson, E. T. Arakawa, R. H. Ritchie and R. D. Birkhoff, Emission Spectra of Elektron Irradiated Metal Foils, ORNL-3450, 1963.
16. A. L. Frank, E. T. Arakawa and R. D. Birkhoff, Phys. Rev. 126, 1947, 1962; E. T. Arakawa, L. C. Emerson, D. C. Hammer and R. D. Birkhoff, Phys. Rev. 131, 719, 1963.
17. Shoji Tanaka and Joshifumi Katayama, J. Phys. Soc. Japan 19, 40, 1964.
18. W. Steinmann, Phys. Rev. Letts. 5, 470, 1960; Zs. Phys. 163, 92, 1961; R. W. Brown, P. Wessel and E. P. Tronson, Phys. Rev. Letts. 5, 472, 1961; A. L. Frank, E. T. Arakawa and R. D. Birkhoff, Phys. Rev. 126, 1947, 1962.
19. P. von Blanckenhagen, H. Boersch, D. Fritsche, H. G. Seifert und G. Sauerbrey, Phys. Letts. 11, 296, 1964.
20. R. A. Ferrell, Phys. Rev. 111, 1214, 1958; R. H. Ritchie, Bull. Amer. Phys. Soc. 4, 381, 1959; R. A. Ferrell and E. A. Stern, Amer. J. Phys. 30, 810, 1962; P. Wessel, Bull. Amer. Phys. Soc. 6, 310, 1961.
21. E. A. Stern, Phys. Rev. Letts. 8, 7, 1962.
22. V. P. Szilin—E. P. Fetiszov, Phys. Rev. Letts. 7, 374, 1961; ЖЭТФ, 45, 1572, 1963.
23. I. M. Frank, УФН, 75, 231, 1961.
24. D. K. Aitken, R. E. Jennings, A. S. L. Parsons and R. N. F. Walker, Proc. Phys. Soc. 82, 711, 1963.
25. V. E. Pafomov—I. M. Frank, Препринт ФИАН А—76 (1965).

AUFS TÍPUSÚ MEMBRÁNSZŰRŐ ÉS NÉHÁNY ROST-SZŰRŐ RADONBOMLÁSTERMÉK-SZŰRÉSI HATÁSFOKÁNAK MEGHATÁROZÁSA

TÓTH ÁRPÁD

MÉV Egészségügyi Szolgálat, Pécs,

Összefoglalás

A közlemény a lakószobák levegőjében található radonbomlástermékekre, valamint az AUFS típusú membránszűrőre és néhány rostszűrőfajtára vonatkozó szűrési hatások meghatározásának egyszerű módszerét tárgyalja. Irodalmi és saját kísérleti eredményeket közöl. Megállapítja, hogy — adott vizsgálati feltételek esetén, — az 1964 előtt gyártott AUFS szűrők szűrési hatásfoka ($\eta_F = 93,3\%$) kisebb, mint az 1966-ban előállítottaké. ($\eta_F = 98,9$). A szűrési hatások sebességfüggésének vizsgálata után a dolgozat kísérletileg igazolja, hogy megegyeznek az RaA, RaB és RaC radontermékekre vonatkozó szűrési hatások. Kimutatja a dolgozat, hogy az 1966-ban gyártott AUFS szűrők ($v_0 \cdot \eta_F \cdot k_d$) jósaági tényezője (ahol: v_0 a légsebesség a szűrőn át, k_d az önabszorpció) kedvezőtlenebb az 1964 előtt előállítottakénál.

Bevezetés

A populáció természetes sugárterhelésének nagy hányadát a zárt lakószobák levegőjében levő radonbomlástermékek belégzéséből eredő dózis képezi. A szoba-levegőbeli radonbomlástermék-koncentráció meghatározására aspirációs eljárást alkalmazunk: a radonbomlástermékeket membránszűrőn bedúsítjuk, majd alfa-radioaktivitásukat megmérjük. Mivel a radonbomlástermékek bizonyos hányada a szűrőn áthalad és ezért nem detektálható, szükséges, hogy az alkalmazott szűrő szűrési hatásfokát figyelembe vegyük. A közlemény a szűrési hatások egyszerű meghatározási módszerét tárgyalja.

A szűrési hatások fogalma és közelítő meghatározási módja

Ha monodiszperz aeroszolt állandó és ismert v_0 sebességgel szívunk át egymás alá helyezett, megegyező vastagságú és azonos szűrési hatásfokú két szűrőrétegen, majd az expozíció utáni, ugyanazon t időtartam alatt meghatározzuk a felső szűrő Q_1 , valamint az alsó szűrő Q_2 alfa radioaktivitását, akkor a szűrési hatások (1, 2, 9, 10c, 11, 15)

$$\eta_F = 1 - \frac{Q_2}{Q_1} = 1 - \frac{N_2 \cdot \eta_{\alpha 1}}{N_2 \cdot \eta_{\alpha 2}}, \quad (1)$$

ahol N_1 és N_2 az ugyanazon t időtartam folyamán a két különböző alfasugármérő műszerrel (a felső, illetve az alsó szűrőn) észlelt, holtidőre korrigált, háttérnélküli számlálási sebességek értékei (cpm)-ban; $\eta_{\alpha 1}$ és $\eta_{\alpha 2}$ a két különböző mérőműszernek ugyanarra a standardforrásra vonatkozó alfa számlálási hatásfoka.

Az (1) képletnek radonbomlástermékekre való alkalmazásakor fel kell tételezni, hogy az aeroszol behatolási mélysége, valamint az egyes radonbomlástermék-elemek aktivitás-aránya az alsó és felső szűrőnél megegyezik. Feltéve, hogy a háttér jelentéktelen, emellett az alfa számlálási hatások és a holtidő hibái elhanyagolhatóak, az (1) képlettel nyert η_F szűrési hatások összes számlálási statisztikai hibája:

$$\delta_{\eta_F} = \pm (\delta_{N_1}^2 + \delta_{N_2}^2)^{1/2} = \frac{100}{t^{1/2}} \left(\frac{N_1 + N_2}{N_1 \cdot N_2} \right)^{1/2} \quad (2)$$

Mivel jó (70% feletti) hatásokú szűrő esetében az $N_1 \gg N_2$, ezért az η_F összes számlálási statisztikai hibáját lényegében az alsó szűrőn észlelt számlálási sebesség hibája szabja meg.

A (2) képletben természetesen nem szerepelnek az alsó és felső szűrőrétegek paraméterei (vastagság, szűrési hatások, aeroszolbehatolási mélység)-ben esetleg fennálló eltérések (szisztematikus hibák). Arra kell törekedni, hogy mennél kisebbek legyenek ezek az eltérések. (Figyelembeveendő, hogy a továbbiakban hibák alatt csupán számlálási statisztikai jellegű hibákat értünk.)

A szűrési hatások függ: az aeroszol és a szűrőanyag tulajdonságaitól, valamint a szívátás lineáris sebességétől. (6, 9, 10c)

Az aeroszol tulajdonságai közül a legfontosabbak:

- a) a szemcseméret — eloszlás;
- b) az inaktív aeroszolkoncentráció (mely az előforduló összes szemcseméretet felöleli);
- c) az inaktív aeroszol anyagi minősége, a szemcsék alakja;
- d) a szabad és az összesen jelenlevő radontermékatomok aránya;
- e) eltűnési állandó („fal-effektus”), mely a szoba — levegőbeli radontermékek esetében fontos paraméter;
- f) koagulációs — konstans.

A szűrőanyag jellemzői:

- a) pórusátmérő (membránszűrők esetén), rost-szálátmérő (rostos-szűrők esetén);
- b) áramlási ellenállás (a szűrőn fellépő nyomásesés, melyet normáltérfogot számításakor figyelembe kell venni)
- c) vastagság,
- d) porozitás,
- e) fajsúly,
- f) elektrosztatikus töltés nagysága a szűrőfelületen.

Az aeroszoknak a szűrőanyag által való befogását a diffúziós, — ütközési, — tehetetlenségi, — elektrosztatikai és a kiostálódási effektusok határozzák meg (6), melyek különféle módon függnek a szívátási sebességtől és az aeroszol szemcseméretétől.

Az azonos vizsgálati feltételek (9) betartása érdekében a szűrési hatásfokot szobalevegőre határoztuk meg, mivel az ismeretlen bomlástermék — koncentrációkat is szobák légterében vizsgáljuk.

Irodalmi tapasztalatok rost-szűrők radontermék-szűrési hatásfokára

Egyes szerzők (5) FPP-15 típusú rostos szűrőkkel azt észlelték, hogy $5 \cdot 10^{-4}$ mg/m³ értékű inaktív portartalom esetén (ilyenkor a RaA csak atomos, tehát aeroszolokhoz nem tapadott állapotban van jelen a levegőben) nagyobb (99,74; 98,95 és 96,80%) volt a RaA, — RaB, — és Ra C-re vonatkozó szűrési hatásfok, mint $5 \cdot 10^{-2}$ mg/m³ esetén (ekkor mindhárom elemre egyaránt 93,36% hatásfokot kaptak).

Azt is észlelték (5), hogy a légsebesség növelésével nőtt a szűrési hatásfok.

Mások (6) szerint kis inaktív portartalom esetében a radontermékeket hordozó szemcsék mérete szűk tartományba esik, és jobban szűrnék a kisebb rostátmérőjű FPP szűrők.

Vizsgálták (13) a Whatman No 41 típusú szűrőanyagnak a radontermékekre vonatkozó hatásfokát az inaktív portartalom, relatív nedvességtartalom és a légsebesség függvényében. Megállapították, hogy kis inaktív portartalom esetén a légsebesség növelésével növekszik a szűrési hatásfok, bármilyen nedvességtartalom mellett.

Igazolták (16) azt is, hogy a szabad radontermékionokat a rost-szűrők nagyobb hatásfokkal szűrik, mint az aeroszolokhoz tapadott radontermékeket.

A membránszűrők tulajdonságai

A membránszűrők általános tulajdonságait több (3, 7, 8, 10b, 14) közlemény tárgyalja. A membránszűrő sajátosságai:

- a) kis súlyú
- b) nem higroszkópos
- c) jó szilárdságú
- d) mintavétel folyamán kis deformálódást szenved;
- e) 100% közeli a szűrési hatásfoka (visszatartja még az 5 m μ méretű szemcséket is.)
- f) elektron, — és fénymikroszkópos szemcsenagyságelemzésre alkalmas,
- g) nagy az elektrosztatikai töltése (ez elősegíti az aeroszol-leüleptést, de zavarja a szűrő súlymérését),
- h) nagy a felületi ellenállása és nagy a dielektromos állandója (ezért jól megtartja saját elektrosztatikus töltését a membránszűrő),
- i) kis aeroszolbehatolási mélység (kis alfarész önabszorpció, ezért választottuk mi is a membránszűrőt),
- j) elviseli a (– 80 °C) és (+ 120 °C) közötti hőmérsékletet.
- k) oldódik: acetonban, ciklohexanban, stb.
- l) egyszerű és olcsó mintavevő berendezést igényel, ezért terepen végzett munkákra igen alkalmas.

Az 1. sz. táblázatban foglaljuk össze az „AUF” és a külföldön széleskörben alkalmazott „AA”-típusú membránszűrők speciális adatait (8, 12, 14, 15).

Nagyon kevés irodalmi adat áll rendelkezésre membránszűrők radonbomlástermék szűrési hatásfokát illetően. A 0,80 μ pórusátmérőjű membránszűrő radontermékszűrési hatásfoka lényegében 100% értékű (4), mind a megszárt, mind a meg nem szárt levegőre, valamint 33 és 4,3 cm/sec sebességre egyaránt. Szabadlevegőbeli

(RaB + RaC)-aeroszolra és „AA” típusú membránszűrőre gyakorlatilag 100% a szűrési hatások (14), a 45 és 117 cm/sec sebességtartományban.

Saját kísérleteink eredményei

1. Rostos szűrők, illetve szűrőpapírok radontermék-szűrési hatásfoka.

Megvizsgáltuk a No 41, No 540, No 541, és a szovjet FPP-25 típusú szűrőknek a szobalevegőbeli radontermékekre vonatkozó szűrési hatásfokait.

A kísérlet körülményei:

- az egymás alá helyezett két szűrőn 5, illetve 10 percig szívtuk át a levegőt,
- normál-állapotra redukáltuk a szűrőn átszívott levegőtérfigatát, ez alapján számítottuk a v_0 légforgalmat (liter-perc)-ben.
- 2%-on belül megegyeztek az alsó, illetve felső szűrők felületi tömegei (vastagságai),

1. TÁBLÁZAT

Az AUFS és az AA típusú membránszűrők specifikációi

	AUFS	AA
Szűrő átmérő (cm)	3,5	3,5
Szűrő vastagság (mikron)	118	164
Felületi tömeg (mg/cm ²)	5,05	4,8
Közepes pórus-sugár (mikron)*	0,405	0,164
Pórus-átmérő a gyár szerint (mikron)	0,6–0,9	0,80
Pórus-átmérő (mikron)**	1,60	0,80
Pórus-sűrűség (cm ⁻²)	1,4·10 ⁸	8,5·10 ⁸
Porozitás (%)	76	73
Szűrő fajsúlya (g/cm ³)	0,42	0,22
Permeabilitás, k (cm ²)**	8,703·10 ⁻⁹	1,346·10 ⁻⁹
A totális szűrési hatások (%) monodiszpersz, kb. 0,55 mikron átmérőjű SiO ₂ -aeroszolra, az 5–100 cm/sec sebességtartományban:	88–96	—
A totális szűrési hatások (%), 0,1 mikron alatti méretű WO ₃ -aeroszolra, az 50-től 200 cm/sec közötti tartományban lényegében független a sebességtől és	94,2 ± 3,1 %	—
A szűrőn fellépő Δp nyomásesésnek a vonalas sebességtől való függése:	lineáris	lineáris
A Δp értéke $v = 70$ cm/sec-nél (Hgmm)	~ 10	~ 130
A Δp értéke $v = 200$ cm/sec-nél (mmH ₂ O)	~ 1000	—
A Δp értéke $v = 211$ cm/sec-nél (Hgmm)	—	570
A portorhelés hatásaként a 10%-os áramlási sebességsökkenéshez tartozó átszívott légtérfigat (m ³ /cm ²)	—	6,3 ± 0,3

* a Hagen-Poiseuille-szabály alapján meghatározva

** $k = L \cdot \eta / A \cdot S$; (η a levegő viszkozitása: A a szűrő felülete; $S = \Delta p / Q$; Δp a nyomásesés; Q áramlási sebesség = $A \cdot v$.)

*** a Millipore Filter Corporation adatai szerint (1964 előtt gyártott AUFS-ekre nézve).

2. TÁBLÁZAT

Rostos szűrők szűrési hatásfokai, önabszorpciós és jósági tényezői szobalevegőbeli radontermékekre

A szűrő		Átlagos légssebesség két szűrőn át v_0 (cm/sec)	Az átlagos szűrési hatásfok		Közelítő önabszorpciós tényező k_{δ} (%) ***	Átlagos légssebesség egyszeres szűrőn át (cm/sec)	Jósági tényező közelítő értéke $\frac{v_0 \cdot \bar{\eta}_F \cdot k_{\delta}}{10^4}$	Megjegyzés (A (14) által szabadlevegőbeli RaB+C aeroszolra kapott η_F)
típusa	vastagsága (mg/cm ²)		értéke $\bar{\eta}_F$ (%)	szórása* $\delta \bar{\eta}_F$ (±%)				
No 41	9	86,0	81,4	4,1	88	87,6	61,5	82,2% ($v_0 = 57$ cm/s esetén)
No 540	10	33,3	78,0	6,2	—	—	—	—
No 541	7	142,0	81,0	3,3	74	155,0	85,0	82,4% ($v_0 = 122$ cm/s esetén)
FPP—25	9**	106,0	69,0	2,6	89	105,0	65,0	—

* A (2) képlettel meghatározott egyes δ_i számlálási statisztikai hibák alapján, n számú mérésre az $\bar{\eta}_F$ érték közelítő szórását, statisztikai hibáját ezzel a képlettel számítottuk: $\delta \bar{\eta}_F \approx n^{-2/2} \sum |\delta_i|$.

** Merevítő gáz-alátéttel együtt.

*** $k_{\delta} = (100 - \text{szűrőben elnyelődött } \alpha\text{-részecske hányad, \% -ban})$.

- d) a szűrők alfaaktivitásait a mintavétel befejezésétől számított 2. és 32. percek között, összekalibrált berendezésekkel észleltük; a holtidő és háttérkorrekció elhanyagolható volt.
- e) a két szűrőn már áthaladt szobalevegőt nem vezettük ki a szobából,
- f) plexiből készült szűrőbefogófejet használtunk,
- g) 32 mm volt a szűrők exponált felületének átmérője.

A kapott eredményeket a 2. sz. táblázatunk tünteti fel.

A 2. sz. táblázat adatait vizsgálva kiderül, hogy a tanulmányozott rostos-szűrők közül a No 541 típusú a legkedvezőbb. Másrészt η_F adataink jól egyeznek másokéval (14).

Megjegyezzük, hogy a k_0 meghatározása rostos szűrőkre a membránszűrőkre használt eljárással (18) történt és ezért csupán megközelítő jellegű. Így a jósági tényező is közelítőleges.

Alfaaktivitásmérés esetén nem célszerű rostos szűrőt használni, mivel ennek önabszorpciós tényezője kedvezőtlenül kicsi (még $k_0=0,62$ -re is lemehet (17)). Ezért választottuk vizsgálatainkhoz inkább a membránszűrőt.

2. AUFS típusú membránszűrők radontermékszűrési hatásfoka:

A kísérleteket általában olyan körülmények mellett végeztük, mint a rostos-szűrők vizsgálatakor. (Lásd előbb). Az alsó és felső membránszűrők felületi tömegei között előfordult azonban 7%-os átlagos eltérés is. A nagyobbbrészt 5 percig exponált AUFS szűrők alfa-aktivitását a mintavételtől számított 1 és 33 percek között (főleg 1 és 15 perc között) észleltük. Így a RaA és RaC'-elemek alfasugárzását detektáltuk. Membránszűrők expozíciójakor előfordult a 32 mm mellett 25 mm-es exponált szűrőfelület átmérő is (3. táblázat).

Összesen 89 szűrési hatásfokmérést végeztünk el, különböző időszakokban, különféle körülmények mellett, de mindig zárt szobalevegőben. A 89 mérést 3000 db, különböző gyártási idejű AUFS szűrőkészletből, szűrőpróbaszerűen kiválasztott szűrő-mintákon hajtottuk végre. (3. sz. táblázat.)

A 3. táblázatból megállapíthatjuk, hogy

- a) az 1964-ben, vagy 1964 előtt gyártott AUFS szűrők esetén, a 84,8 és 186 cm/sec sebességtartományban lényegében változatlan a radontermékszűrési hatásfok, 51 mérésből, átlagosan:

$$\bar{\eta}_F = 93,3\%.$$

Ez az érték igen jól egyezik (12) eredményével, aki az 50 és 200 cm/sec tartományban, $0,1 \mu$ alatti méretű WO_3 -aeroszólnál AUFS-re (1964, vagy ezelőtt előállított AUFS-re) átlagértékben

$$\bar{\eta}_F = 94,2 \pm 3,1\%$$

adatot nyert (lásd 1. táblázatban is).

- b) 1966-os előállítású AUFS-ek esetén, 38 mérésből átlagosan, 56,4 cm/sec sebesség mellett:

$$\bar{\eta}_F = 98,9\%$$

tehát kb. 6%-kal nagyobb, mint az 1964-es AUFS-ekre.

- c) Amint az várható is, azonos szivattyú teljesítmény mellett, az η_F mérés alkalmával, használt két szűrőn keresztül jóval (40—90%-kal) kisebb a levegő-áramlási sebesség, mint a k_0 és az ismeretlen radontermékkoncentráció

3. TÁBLÁZAT

AUF S típusú membránszűrők szűrési hatásfoka szobalevegőbeli (RaA + RaB + RaC) radontermékekre

Gyártási év	Mérés dátuma	Átlagos légsebesség két szűrőn át v_0 (cm/s)	Átlagos szűrési hatásfok		$\left(\frac{\eta_{F \max} - \eta_{F \min}}{\bar{\eta}_F} \right)$ (%)	Ön- abszorpció k_{δ} (%)	Átlagos légsebesség egyszeres szűrőn át v_1 (cm/s)	Jósági tényező $\left(\frac{v_0 \cdot \bar{\eta}_F \cdot k_{\delta}}{10^4} \right)$
			értéke $\bar{\eta}_F$ (%)	szórása** $\delta \bar{\eta}_F$ (± %)				
1964 és 1964 előtt	1965. 07— 1966. 04	113 (és 186)*	93,0	1,2	9,3	90,4 ***	160 (és 268)*	95 (és 156)*
1964	1966. 09. 07—08	84,8	93,3	3,2	7,4	90,4 ***	160	71,5
1964	1966. 09. 16	104,4	93,6	7,0	7,3	90,4 ***	160	88,5
1966	1966. 09 14—20	56,4	98,9	5,4	3,2	92,2	113	51,4

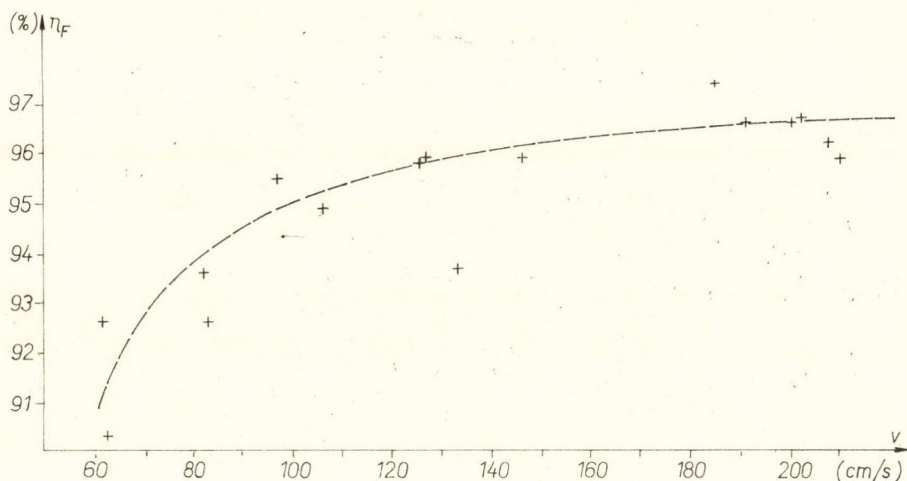
* 25 mm-es exponált szűrőfelület-átmérő esetén.

** lásd a 2. sz. táblázat *-jelű megjegyzését.

*** lásd (18) 2. táblázatbeli k_{δ} -tényezők átlaga.

mérés során alkalmazott egyetlen szűrőn át. Lejjebb látjuk (lásd 1. ábra), hogy a szűrési hatások nővekszik a légsebesség növekedésével. Ez viszont nem okoz nagy hibát.

- d) Az 1966-os gyártású szűrők jósági tényezője (a jósági tényező az AUFS szűrő sajátosságai mellett bizonyos mértékben függ a kísérlet körülményeitől is. Ha azonban állandó kísérleti viszonyok mellett vizsgáljuk a különféle években gyártott AUFS-eket — ahogy mi ezt tettük —, akkor kiderülnek az AUFS-ek eltérő sajátosságai), lényegesen kisebb, mint az 1964-ben, vagy 1964 előtt készített AUFS szűrőké. Így az 1966-os AUFS-ek kevésbé megfelelők céljainkra.
- e) A 3. sz. táblázat 6. oszlopában feltüntetett adatok szerint az egyes 1966-os AUFS-szűrők szűrési hatásfokai kb. 2—3-szor kevésbé szórnak egymásközt, mint az 1964-es AUFS-ekéi. Megjegyzendő azonban, hogy az 1966-os gyártású szűrők hatásfokait jóval rövidebb időszakasz folyamán kaptuk, mint a korábbiakat.



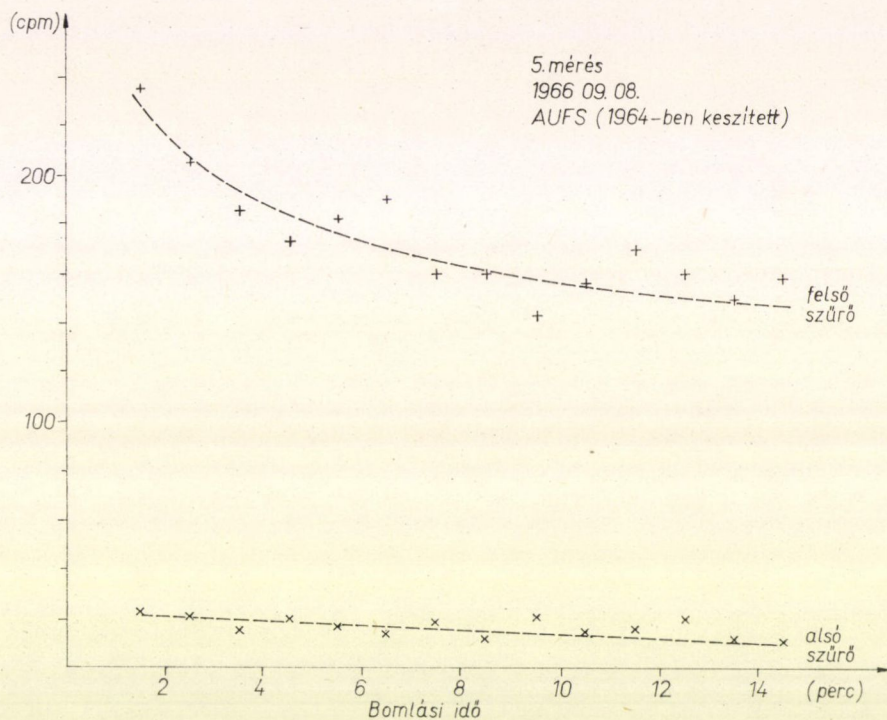
1. ábra. A radontermékszűrési hatások sebességfüggése.

- f) Az áttekinthetőség megőrzése érdekében a 3. táblázatban ugyan nem tüntettük fel külön a szűrő aktivitásmérésének időtartamait — viszont fontos megemlíteni, hogy az 1964-es gyártású szűrők esetén (ahol még többféle lecsengési időtartam fordult elő) 0,7%-on (jóval az előforduló hibákon) belül megegyeztek az 1—33 perc közötti és az 1—15 perc közötti lecsengési időszakaszokra vonatkozó szűrési hatásfokok. Eszerint nem lehet nagy az eltérés a RaA-ra és a RaC'-re vonatkozó szűrési hatásfokok között (lásd 4. táblázatunkat, ahol ezt igazoltuk is) sem.

Az 1. ábra és a 3. táblázat együttes szemügyrevételéből következik, hogy a szűrési hatások sebességfüggése igen kis (legfeljebb 2—3%-os) hibát okoz, az előfordult sebességtartományban. Ez a kis eltérés jelentéktelen a sugárvédelmi mérések szempontjából, így nyugodtan lehet alkalmazni az eltérő légsebességek mellett nyert η_F és k_d tényezők értékeit az ismeretlen koncentrációk mérésekor.

Néhány méréssel megvizsgáltuk a szűrési hatások sebességfüggését. Az 1. ábrán feltüntetett adatok számlálási statisztikai hibái 6 és 9% közöttiek.

Mindezideig a RaA, RaB és RaC elemekre összesen vonatkozó átlagos szűrési hatásfokról beszéltünk. Az egyes radontermék-elemekre érvényes szűrési hatásfokokat nem ismertük, de amint korábban, a 3. táblázattal kapcsolatban már említettük, ezek között nagy eltérést nem lehet várni. Ezt a feltételezést igazoltuk is. 1964-es AUFS szűrők esetén 10 mérésből meghatároztuk, — az általunk szobalevegőre is



2. ábra. Egyik bomlásgörbepár a RaA, RaB és RaC elemekre vonatkozó szűrési hatások megállapításához.

behitelesített (19) módszerrel — mind az alsó, mind a felső AUFS-szűrőkre vonatkozó RaA, RaB és RaC koncentrációkat és ezek alapján az említett elemekre vonatkozó szűrési hatásfokokat, a 2. ábrán feltüntetett lefutású bomlásgörbék (mely ábra a 10 mérésből csupán egyetlen, az 5. mérésre szolgáltat adatokat) alapján.

Megemlítjük, hogy a szelektív szűrési hatásméréseket, zárt szoba természetes radontermék-koncentrációjával, tehát mindenféle mesterséges dúsítás nélkül végeztük. Minthogy a szobalevegőbeli koncentráció elég kicsi volt, ezért az egyes meghatározások statisztikai hibája viszonylag nagy (az alsó szűrőkre 15 és 40% közötti), viszont, a 10 mérésre vonatkozó átlagértékek hibái már jóval kisebbek (8 és 10% közöttiek).

A 4. táblázatban találjuk a szelektív radontermékszűrési hatások mérési adatait.

4. TÁBLÁZAT

AUFS szűrőanyag szűrési hatásfoka szobalevegőbeli RaA, RaB és RaC-re
(1964-es AUFS szűrők. A mérés időpontja: 1966.09.07 és 08)

Mérés sorszama	A szűrési hatásfok, η_F (%)					
	értéke RaA-ra (%)	statisztikai hibája (\pm %)	értéke RaB-re (%)	statisztikai hibája (\pm %)	értéke RaC-re (%)	statisztikai hibája (\pm %)
1.	84,0	40,0	92,5	34,0	100,0	40,0
2.	100,0	40,0	91,2	25,0	84,3	40,0
3.	80,4	36,0	95,4	30,0	91,5	36,0
4.	95,0	27,0	91,2	21,0	90,4	27,0
5.*	94,8	20,0	90,0	15,0	88,7	20,0
6.	88,0	28,0	92,7	24,0	93,9	28,0
7.	93,9	37,0	96,9	28,0	97,4	37,0
8.	95,7	21,0	90,3	15,0	88,6	21,0
9.	98,7	29,0	94,0	21,0	94,2	29,0
10.	91,6	30,0	94,9	23,0	95,3	30,0
számtani átlag	92,2	9,8**	92,9	7,5**	92,4	9,8**

* Lásd a 2. ábrát, melynek alapján a számítás ebben az esetben történt.

** A $\delta_{\eta_F} \approx n^{-3/2} \Sigma |\delta_i|$ közelítő képlettel kapott érték.

Amint a 4. sz. táblázatban feltüntetett számtani átlagok mutatják, nincs eltérés az egyes radontermékelemekre vonatkozó átlagos szűrési hatásfokok között, jóllehet az egyes mérési sorozatokban az egyes elemekre kapott szűrési hatásfokok egymás között elég nagy szórást mutatnak. Az észlelt szórás azonban mindig belül esett az egyszerű koncentráció meghatározásra vonatkozó (metodikai + statisztikai)-hibák összegén. A viszonylag magas statisztikai hiba — mint már előbb is említettük — abból eredt, hogy az adott koncentrációmérési módszerrel (19) 5 perces levegőszívás és adott légsebesség mellett kevés radonbomlásterméket lehetett az AUFS-eken bedúsítani, mivel a kísérleti helységben kicsi volt a természetes radonbomlástermék-koncentráció. Ennek tudatában még inkább kedvezőknek tarthatjuk a kapott átlagos szűrési hatásfokok kitűnő egyezését (92,2; 92,9 és 92,4, melyek számtani átlaga: 92,5%).

Amint a 3. táblázatban (második sor, negyedik és ötödik oszlop) láttuk, az — ugyanezen mérési sorozatra, de mindhárom radonbomlástermék-elemre vonatkozó átlagos szűrési hatásfok: $93,3 \pm 3,2\%$ értékű volt, csupán 0,9%-kal több, mint az egyes elemekre vonatkozó szűrési hatásfok.

A szelektív radontermék-szűrési hatásfok vizsgálatából két fontos következtetés adódik:

1. egyszerűbb a RaA, RaB és RaC koncentrációk számítása, mivel mindhárom elemhez ugyanazt a szűrési hatásfokot használhatjuk;
2. az (5) alapján feltehető, hogy a szobalevegőbeli RaA, RaB és RaC diszperz állapota azonos volt (ezt a fontos tényt ilyen természetű vizsgálattal a továbbiakban is mindig ellenőrizni lehet, ha eziránt alapos kétség merülne fel.)

Köszönetnyilvánítás

Köszönet illeti Péter József és Péter Józsefné munkatársaimat a mérésekben nyújtott segítségükért.

IRODALOM

1. D. Hasenclever, Staub. Heft 44., 159—173 (1956)
2. D. Hasenclever, Staub. 19, Nr. 2, 37—43 (1959 Feb.)
3. W. Walkenhorst, Staub, 19, Nr. 3, 69 (1959. Marz.)
4. D. E. Anderson, Am. Industr. Hyg. Assoc. Journ. 21, No. 5., 428—429. (1960)
5. I. I. Kornilenko et. al, Symposium über die technischen Fragen des Strahlenschutzes, Teil II., Warschau, 25—29, Sept. 1962, 293—326.
6. B. I. Ogorodnyikov et. al, Atomnaja Energija 15, No 3, 230—237, (1963)
7. K. Spurný, J. Pich, Zentralblatt Biol. Aerosol—Forschung 11, 508—511 (1963/64)
8. K. Spurný, J. Pich. in: „AEROSOLS, Physical Chemistry and Applications”, prepared by K. Spurný, (Proc. First Nat. Conf. on Aerosols, held at Liblice near Prague, Oct. 8—13, 1962) 265—276, Publishing House Tzechoslov. Acad. Sci. Prague, (1965).
9. J. Tuma, Ibidem. 693—698.
10. K. Spurný et al.: „Aerozoli” (Perevod sz cseszkovo: H. V. Rjabov, i. K. N. Sztasz, pod. red. K. P. Markov i M. N. Peselnyikov) a.: 108—111; b.: 114—120; c.: 307—319, Atomizdat, Moszkva, (1964)
11. V. I. Ivanov: „Dozimetrija Ioniziruyuschih Izlucsenij”, Atomizdat, Moszkva, (1964) 201—207.
12. K. Schmidt, Acta Geophys. Polon. XII., No. 3., 135—141 (1964)
13. T. Inouye et al, in: „Radiological Health and Safety in Mining and Milling of Nuclear Materials” Vol I., I.A.E.A. Vienna, (1964) 459—470.
14. L. B. Lockhart et al.: NLR Report 6054, March 20, 1964. US. Naval Research Laboratory, Washington, 17. p.
15. V. Lössner, SZS 2 Report (1965), 35 p, Staatliche Zentrale für Strahlenschutz, Berlin—Friedrichshagen.
16. J. Fontan et al: Health Physics 11, No. 1., 15—20 (1965)
17. Ju. T. Kapitanov et al: Izv. viszsih ucsebnih zavegyenyij; Geol. i Razvedka, 1960. No 4, 118—125.
18. Tóth Árpád, A rövidéletű radonbomlástermékek alfa részecskéinek önabszorpciója AUFS típusú membránszűrőben. Standardforrást nem igénylő módszer a (számlálási hatások \times önabszorpció tényező)-szorzat meghatározására. (Acta Phys. Sci. Hung., 1968).
19. Á. Tóth., II. Symp. on Health Physics, Pécs, Hungary, Sept. 26—30. 1966. Vol. II., 75—79.

KÖNYVISMERTETÉS

J. Kvasnica: PHYSICAL FIELDS

Iliffe Books Ltd., London 1966

A jelenkor fizikájának talán egyik legérdekesebb ága az anyagi világ parányi „részecskéi” az „elemi” részek közötti kölcsönhatások vizsgálatával foglalkozó térelmélet. Ezért érdeklődéssel fordulunk J. Kvasnica fizikai terekkel foglalkozó könyve felé. Fizikai térről, erőteréről tulajdonképpen Faraday óta beszélhetünk csupán, aki forradalmian új szemléletet adott az elektromos és mágneses jelenségek tárgyalásmódjában azáltal, hogy figyelmét a töltésekről, mágneses testekről stb. az ezek közötti közegre fordította és bevezette az elektromos és mágneses tér fogalmát. Faraday megállapításait ezután Maxwell öltöztette megfelelő matematikai formába, aki még ezen túlmenően számos új, és értékes megállapítással bővítette azokat.

J. Kvasnica „Bevezetés a fizikába” cseh szerzők által írt angol nyelvű sorozat keretében jelent, 8 fejezetből álló kis könyve könnyen érthető, de mégis átfogó képet kíván nyújtani a fizikai terekről, a fizikai alapképzettséggel rendelkező, nem kifejezetten szakembereknek, mérnököknek, egyetemi hallgatóknak. A szerző végigvezeti az olvasót a Maxwell egyenletektől a modern térelméletig vezető úton; és ehhez jó útikönyvet ad kezébe.

A szerző hangoztatja, hogy a jelenleg birtokunkban levő módszer alkalmazható az elemi részecskék különböző tulajdonságainak és kölcsönhatásának (szóródás, bomlás stb.) kiszámítására, de a különböző részecskékre, vagy részecskecsoportokra más és más paraméterekkel (tömeg, töltés stb.) ellátott egyenleteket kell használnunk és kiemelni, hogy a ma fizikájának legfőbb problémája: létezik-e az összes elemi részecskét magábanfoglaló általános elmélet. (H. T.)

P. Kratochvíl: CRYSTALS

Iliffe Books Ltd. 1966. London

Cseh eredetijéből angolra fordítva jelent meg Kratochvíl munkája. Sajnos a magyar közönséghez angol nyelven került közelebb, minthogy a szomszédos, és velünk sok-sok évszázadon át sorsközösségben élő cseh nyelvet hazánkban kevésbé ismerik. Ezért a magunk részéről is örömmel üdvözölhetjük ennek a kis ismeretterjesztő jellegű munkának megjelenését. Kratochvíl műve nálunk is hézagpótló, mert rövid, korszerű összefoglalása a hazánkban is sokak által művelt, és sok iparágunkat érintő szilárdtestfizika mai problémáinak. Az anyagszerkezet, a kristálystruktúra, a kristályok növekedésének és növesztésének problémái azonban nemcsak az előbb említett területen dolgozó szakembereket, hanem a nagyközönséget is érdeklik. Kratochvíl könyvecskéjének olvasásához a gimnáziumi szintig eljutó ismeretek teljesen elegendők, a könyv kb. megfelel a mi Műszaki Kiadónk Új Technika sorozatának. (T. Gy).

KIS ÁTMÉRŐJŰ FÉMES KRISTÁLYOK HÚZÁSA OLVADEKBÓL*

KERTÉSZ LÁSZLÓ, HAJDU JÁNOS és HEMELA JÓZSEF

ELTE Kísérleti Fizikai Tanszék

1. A fémek, fémötvözetek, intermetallikus vegyületek, félvezetők stb. különböző fizikai és mechanikai vizsgálataihoz napjainkban egyre több igény mutatkozik kis átmérőjű, rövidebb-hosszabb próbatestek készítésére. A szokásos mechanikai megmunkálás sok esetben nem kívánatos változásokat, deformációkat hoz létre. Ezek utólagos megszüntetése nem mindig biztosítható. Előfordul, hogy az elkészített próbatest normál körülmények között meg sem munkálható.

Gyakran vizsgálják a különböző fizikai paraméterek szerkezettől függő anizotróp sajátságait is. A méréseket ilyenkor legcélszerűbb egykristályokon elvégezni.

2. Vizsgálataink arra irányulnak, milyen feltételek biztosítása mellett lehet meghatározott méretű fém egykristályokat készíteni.

E feladat megoldásához *Czochralski* kristályhúzási módszerét láttuk a legalkalmasabbnak [1], [2]. Az irodalomban talált munkák zöme főleg az egykristály növekedésének biztosítását tűzte ki célul [3], [4]. Az egykristály alakjának módosításával csak néhány cikk foglalkozik, és azt mindannyiszor a keletkező kristályra fűvott hideg gáz mennyiségének változtatásával, vagy különböző profilok alkalmazásával valósítják meg. A módszer bizonytalansága mellett nehézséget jelent a gáz nagyfokú tisztítása, de ezen túlmenően sok anyagnál nem kívánatos a közvetlen olvadáspont alatt levő fémes kristály felületének érintkezése gázzal [5], [6], [7].

Az elmondottakat figyelembe véve, olyan berendezést készítettünk, melynél a próbatest átmérőjének szabályozása nem gáz-hűtéssel történik. Először a húzási sebesség változtatásának hatását tanulmányoztuk.

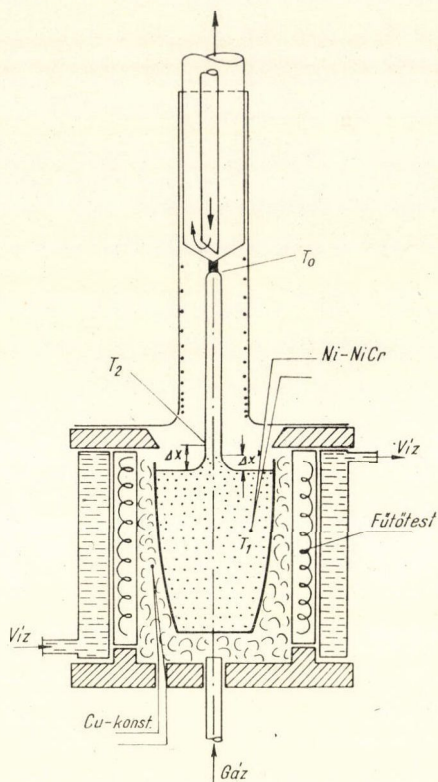
3. Kristályosítandó anyagnak, alacsony olvadáspontja, könnyű kezelhetősége miatt ólmot választottunk.

A kb. 100 cm^3 nagytisztaságú ólmot alumíniumoxid tégelyben olvasztottuk. 500 W teljesítményű, ellenállás-fűtésű kályhát készítettünk, melyet kívülről állandó hőmérsékletű áramló vízköpeny burkol. Ez függetleníti az olvadékot a külső hőmérsékletváltozásoktól és csökkenti a kályha hőtehetetlenségét. A kerámia test és a tégely közötti teret kis hőkapacitású, de jó hővezető laza alumínium fólia tölti ki. A hőmérséklet-szabályozó rendszer Cu-konst. termoeleme szintén e fólia közé kerül. Az olvadék hőmérsékletét külön Ni-NiCr termoelemmel mérjük és kompenzográfálal regisztráljuk.

A termoelemek közös 50°C -os referencia pontját ultratermosztáttal állítottuk be $\pm 0,05^\circ\text{C}$ stabilitással.

A stabilizáló és szabályozó rendszer folyamatos működésű. A kályha fűtését kettős vezérlésű mágneses-erősítő látja el.

* Érkezett 1966. nov. 13.



1. ábra

Egyik vezérlőtekercsét állandó — illetve kézzel változtatható — előmágnesező egyenárammal tápláljuk. A stabilizálni kívánt hőmérsékletnek megfelelő fűtőáramot ezzel állítjuk be közelítőleg.

Második vezérlőtekercsét két, hídba kapcsolt potencióméter hibajele vezérli. Az egyik potenciómétert kézzel a kívánt pontos hőmérsékletre állítjuk be. A másikat abba a kompenzográfba építettük be, amelyikhez a Cu-konst. termoelem csatlakozik. A kályha hőmérsékletingadozásából származó hibajelel megfelelő értelemben a mágneseserősítő vezérlésére kapcsolva, ez a fűtőáramot úgy módosítja, hogy közben a hőmérséklet állandó marad. Ez a szabályozó kompenzográf természetesen regisztrálja is a hőmérséklet-változást, illetve a szabályozás menetét.

A pontosságot növeli az a megoldás, hogy az érzékelő termoelem 15–20 mV termo-feszültségéből egy technikai kompenzátorral annyit kompenzálunk ki, hogy a szabályozó 2 mV-os kompenzográfra mindig kb. 1 mV jusson. Így 1 °C hőmérsékletváltozásra nagyobb hibajelel kapunk.

A szabályozó rendszer és kályha első bekapcsolás utáni beállási ideje 25–30 perc, míg az olvadék hőmérsékletének pl. 10 °C-al történő megváltoztatásához kb. 5 perc szükséges.

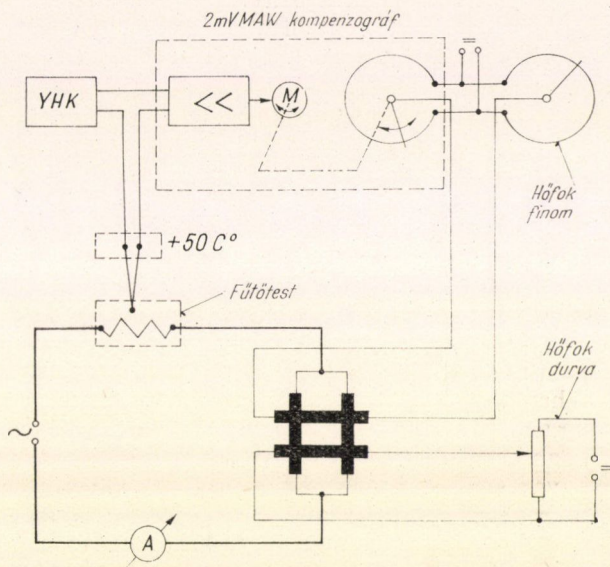
A húzást védőgázban végezzük, de a gáz kis sebességgel a fűtőtesten keresztül áramlik be, tehát előmelegszik és nem hűti a kihúzott kristályt.

Azon feltétel teljesítésére, hogy a kristályosodás közben felszabaduló hő csak a hűtött magon át távozzon, az olvadék felett egy második, az előzőtől független fűtőtest veszi körül a kihúzott kristályt. E fűtőtest közelítőleg olyan hőmérséklet-eloszlást állít elő a kristály környezetében, mint amilyen a kihúzott kristályban van, tehát a sugárzási és a gáz által elszállított konvekciós veszteség a húzótűn elvezetetthez viszonyítva elhanyagolható.

Talán nem érdektelen megjegyezni, hogy a MAW és EPP—09-M3 típusú kompenzográfok csőtollas írószerkezetét eltávolítottuk, és helyettük cserélhetően golyóstoll betétet építettünk be, amely rendkívül üzembiztos.

A hűtött húzótűt köszörült gumigörgők között halad, melyet a meghajtómotor kb. 10^5 -szeres lassító áttételen keresztül húz. Miután a sebességet — a megadott program szerint — rendkívül széles tartományban kell folyamatosan változtatni, a legalkalmasabbnak egy 500 periódusú szinkronmotor látszott. — GAMMA MPR—321 — Szinkron fordulatszáma 10000/perc. Állandó üzemi feszültség mellett a frekvenciát 30 c/s—1,8 kc/s-ig változtatva, a húzási sebesség rendkívül pontosan — és lineárisan — követte a frekvencia változását. Miután a motor minden frek-

vencián azonos feszültséget kap, így még alacsony fordulatszám esetén is nagy nyomatékkel rendelkezik. Célszerűségből az áttételi viszonyokat úgy választottuk meg, hogy a kc/s-ban kifejezett frekvencia mm/s-ban éppen a húzási sebesség számértékét adja. A fenti frekvencia tartományban tehát 0,03 mm/s—1,8 mm/s-ig változhat a húzási sebesség folyamatosan.



2. ábra

Áttétel váltással természetesen mind az alsó, mind a felső sebességhatár még módosítható.

A szinkronmotort kézi szabályozás, illetve állandó húzási sebesség esetén nagy teljesítményű hanggenerátor közvetlenül táplálja. Programozott húzásnál, miután a programot mágnesszalagra rögzítettük, a magnetofon egy 80 W-os teljesítményfokozatot vezérelt, amely már közvetlenül a motort működtette.

A húzási programot tehát 30 c/s—1,8 kc/s-ig terjedő sávban frekvenciában készítettük el, s azt egy négysávos magnetofon egyik sávján rögzítettük, míg a másik sávon a szinkronizálással, indítással, megállítással kapcsolatos információkat tároltuk.

Ezzel a megoldással folyékony fémből vagy fémes oldatból előre kiszámolt és rögzített program szerint, időben nem lineárisan változó sebességű húzás valósítható meg. A gyors és igen pontos reprodukálhatóság lehetővé teszi, hogy egy adott programot más-más külső paraméter (pl. olvadék hőmérséklet) mellett játsszunk végig, s így csak azok hatását tanulmányozzuk.

4. A programozáshoz szükséges számításoknál az alábbiakat vetük figyelembe. A kristályosítandó anyag olvadékát pontosan definiált hőmérsékleten kell tartani. Amennyiben huzamosabb idő eltelte után, az olvadék minden pontjában konstans hőmérséklet alakul ki, felszínének középpontjában megindított kristályo-

sodás — kristálynövekedés — felszabaduló kristályosodási hője az olvadékba nem tud átmenni. A kristály körüli olvadék hőmérséklete ugyanis magasabb, mint a szilárduló kristályé, így a termodinamika II. főtétele szerint a felszabaduló kristályosodási hő nem a magasabb hőmérsékletű olvadékba, hanem az alacsonyabb hőmérsékletű szilárd kristályba megy. A kristályosodási hő tehát a magot tartó fémrúdon, illetve később a már kihúzott kristályon vezethető el.

Az olvadék feletti kis Δx magasságban valamilyen állandó T_2 hőmérsékletet biztosítva, a kristálynövekedés feltételeit állandósíthatjuk. A következő lépés annak tisztázása, hogy a hővezetési egyenlet alkalmazásával milyen módon lehet ezt megvalósítani [8].

A hővezetési egyenlet megoldásánál a húzás alatt levő kristály egy pontjához rögzített koordináta-rendszert használtunk. Miután a cél éppen a hosszához képest kis átmérőjű kristályok — huzalok — készítése, így a megoldást is végtelenbe nyúló félegyenesre végeztük el.

A kezdeti és peremfeltételek a következők: a félegyenes $t=0$ időpontban $T(x, 0)=T_1$ hőmérsékleten van. A kristállyal érintkező húzótűt állandó (T_0) hőmérsékletű vízzel belülről hűtjük, így már a húzás kezdetén az olvadékból kiemelkedő kicsiny kristálynak a húzótűvel érintkező felülete nagyon gyorsan T_0 hőmérsékletet vesz fel, $T(0, t)=T_0$. A téglében levő állandó hőmérsékletű olvadék, mint $T_1 > T_0$ hőmérsékletű hőtartály, húzás közben is állandó hőfokot biztosít.

A félegyenes használhatóságának kritériuma adott esetben azt jelenti, hogy a kezdőponttól elég nagy távolságra a kristály hőmérséklete konstans. Az „elég nagy távolság” is pontosan definiálható azzal a megjegyzéssel, hogy miután nem stacionárius folyamatról van szó, a peremérték hatása (a T_0 hőmérsékletű húzótű hűtőhatása) időben terjed, tehát ez a távolság $t=0$ -tól kezdve időben változik. A félegyenes alkalmazhatóságának feltétele azt követeli meg, hogy mindig lehessen találni egy olyan $\Delta x'$ szakaszt, ahol ez a hatás még nem érvényesül. Ezt húzás közben közvetlenül az olvadék felett levő $\Delta x'$ szakasz biztosítja, megfelelő húzási sebesség esetén. E sebesség a félig végtelenbe nyúló egyenesre érvényes hővezetési egyenlet segítségével számolható ki.

Ez esetben

$$T(x, t) = T_1 \Phi \left(\frac{x}{\sqrt{a^2(t-t_0)}} \right) \quad (1)$$

ahol $T(x, t)$ a kezdőpontból x távolságban és t időpontban a drót hőmérséklete, T_1 az olvadék hőmérséklete közel az olvadási pont felett, és $\Phi \left(\frac{x}{\sqrt{a^2(t-t_0)}} \right)$ a normáloszlású valószínűségi integrál, (a^2) a hőmérsékletvezetési együttható.

A továbbiakban az (1) egyenlet bal oldalát $T(x, t)=T_2$ -nek választva, ($T_2 < T_1$) kiszámíthatjuk, hogy a $t=t'; t''; t''' \dots$ stb. idő elteltével mekkora $x=x'; x''; x''' \dots$ stb. távolságban lesz a hőmérséklet éppen T_2 . A húzás sebességét tehát úgy kell megválasztani, hogy minden $t^{(i)}$ időpontban éppen a hozzátartozó $x^{(i)}$ hosszúságú legyen a kihúzott kristály.

Az (1) egyenletből a programozáshoz megfelelő kifejezés a következő:

$$x = b\sqrt{a^2(t-t_0)} \quad (2)$$

Ez az összefüggés már alkalmas arra, hogy belőle az idő — sebesség függvény meg-

határozható, és a 3. pontban leírtak alapján — frekvenciában — mágnesszalagra rögzíthető legyen.

A két peremfeltétel (T_0 és T_2) változtatásával és kísérleti úton történő meghatározásával állandó keresztmetszetű drót, illetve egykristály huzal előállítása is lehetséges. Az azonos programmal húzott kristályok átmérője kis szórással megegyező. Néhányról különböző pontban Laue-felvételt készítettünk, melyek egykristály keletkezését mutatják.

IRODALOM

- [1] Czochralski, J. Z. physik. Chem. 92, 219, 1918.
- [2] Kyropoulos, S. Z., Z. anorg. Chem. 154, 308, 1926.
- [3] Lawson, W. D.—Nielsen, S.: Preparation of Single Crystals, London, 1958.
- [4] Sztjepanov, A. V.: ZsTF. 29, 318, 1959.
- [5] Goldfarb, V. M.—Golcman, B. M.—Donszkoj, An. V.—Sztjepanov, A. V., Kristallografija, 10, 539, 1965.
- [6] Civinszkij, Sz. V.: Roszt-Krisztallo, VI. (1965)
- [7] Golcman, B. M.: Roszt-Krisztallo, III. 408. (1961)
- [8] Carslaw, H. S.—Jaeger, J. C.: Conduction of Heat in Solids. 1964. „Nauka” oroszul

A JELFORMÁLÁS HATÁSA IMPULZUSALAK DISZKRIMINÁTOR SZEPARÁCIÓS TULAJDONSÁGAIRA*

ZSOLNAY ÉVA és MÁTHÉ GYÖRGY

MTA. Atommag Kutató Intézet, Debrecen

Az impulzusalak diszkrimináció CsJ(Tl) kristály esetében részecske identifikálásra sokkal hatásosabb, ha diszkrimináció előtt az impulzusokat néhány μsec -os integráló körrel formáljuk. A szeparáció mértéke elektronokkal (γ) szemben több mint kettes faktorial javítható.

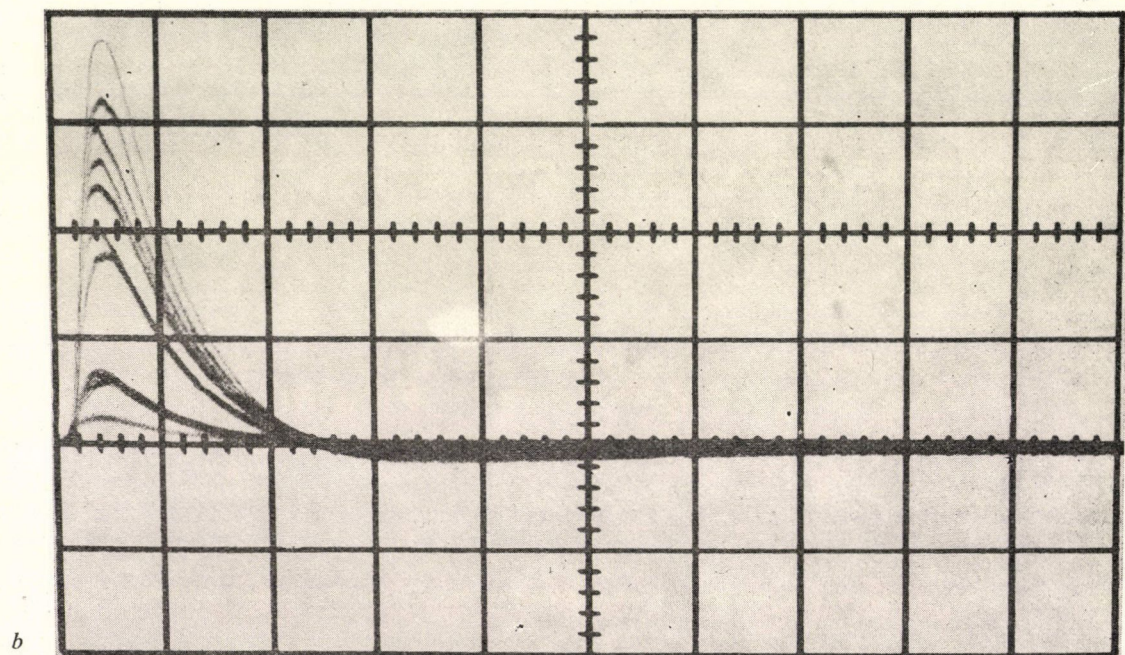
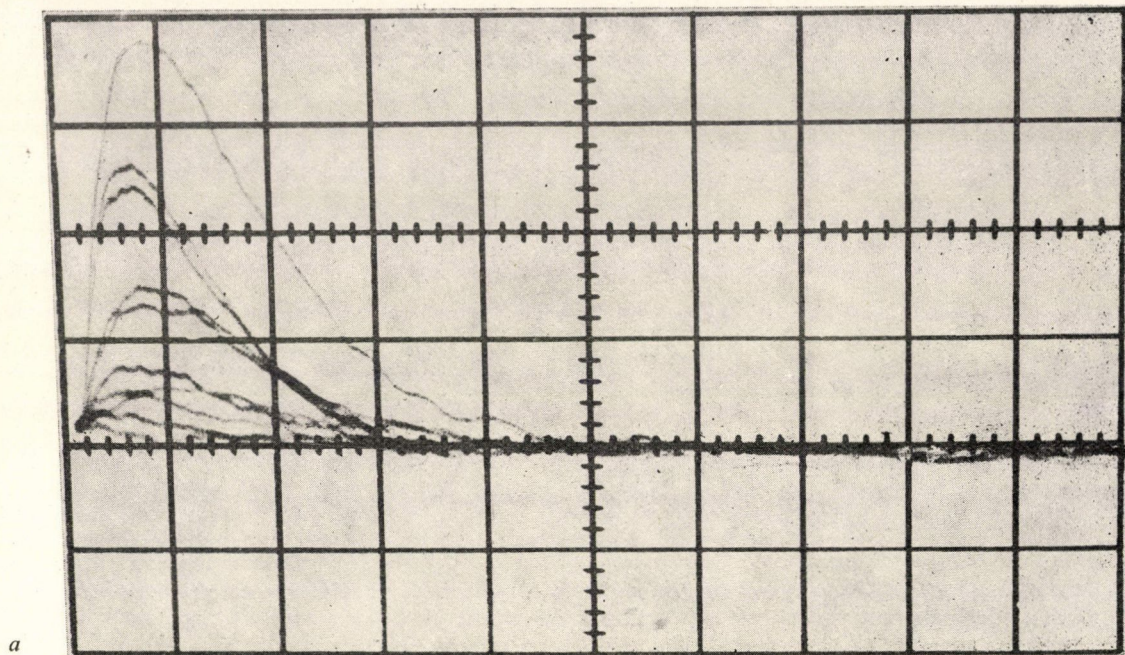
Bevezetés

Részecske identifikálásra néhány év óta igen jó eredménnyel használják az impulzusalak diszkriminációt. Legáltalánosabban a CsJ(Tl) szcintillátort szokták felhasználni erre a célra, mivel ennél a kristálynál igen nagyok az impulzusok emelkedési idejében mutatkozó különbségek, ezenkívül energiamérés szempontjából is a legjobb szcintillátorok közé tartozik [1, 2]. Az intézetben kidolgozott módszer segítségével már korábban meghatároztuk, hogy különböző részecskék esetén (α , p , d , γ) hogyan változik a részecskék szeparációja az energia függvényében [3, 4] (5. ábra, szaggatott vonal).

Mint az 5. ábrából is kitűnik, alacsony energiánál az egyes részecske fajták átfedik egymást, így azok elkülönítése lehetetlenné válik. Ennek az az oka, hogy a detektorból kapott impulzusok alakja nem tökéletesen jól definiált, hanem a detektált részecske energiájától, ezen keresztül a fotokatódból kilépő fotoelektronok számától függően kisebb-nagyobb fluktuációkat mutat. Nagy energiáknál a fluktuáció kicsi, majd az energia csökkenésével fokozatosan nő, 1 MeV alatt pedig olyan nagy, hogy korlátozza a részecskék elválasztását.

Különösen szembevetendő ez a jelenség a CsJ(Tl) impulzusainál, ahol a jelalak fluktuációja lényegesen nagyobb, mint a NaJ(Tl) azonos nagyságú impulzusai esetén. Tájékozódás végett megnéztük az impulzusok alakját CsJ(Tl) majd NaJ(Tl) kristályoknál. A vizsgálat folyamán a rendszer erősítési tényezője állandó értéken volt tartva. A gerjesztő α ill. γ részecskék energiáját úgy változtattuk, hogy az impulzus nagyságok azonos nagyságrendbe essenek a különböző kristályok esetén. Az oszcilloszkópról készített felvételek CsJ(Tl)-nál az 1a, NaJ(Tl)-nál 1b. ábrán láthatók. A CsJ(Tl)-nál jelentkező erős fluktuációt, hullámosságot, részben azzal lehet magyarázni, hogy fényemissziójának lecsengési idejében kis intenzitással hosszabb komponens is jelentkezik. Az a tény, hogy ez a fluktuáció rontja a különböző részek közötti szeparáció lehetőségét, azt sugallta, hogy megfelelő integráló kör segítségével a hullámosságot kisimítva, jobb elválasztást várhatunk az egyes részek között. Az 1c ábrán a CsJ(Tl)-tól származó jelek láthatók integrálás után, melyekből a várakozásnak megfelelően a csipkézettség eltűnt. Az alfa-részek és elektronok jól láthatóan elkülönülnek egymástól, melynek igazolására szolgál az a tény, hogy az ábrán megjelölt — alfa-részeknek ill. elektronoknak megfelelő

* Érkezett 1966. dec. 10.



1. ábra. 1 MeV körüli energiájú alfákkal, és elektronokkal gerjesztett szcintillátorok impulzusalakjai.
 a) CsJ(Tl) esetén erős hullámosság, csipkézettség észlelhető
 b) NaJ(Tl) esetén a fluktuáció sokkal kisebb mértékű,

— görbék metszik egymást, míg az azonos típusú részekről eredő jelek hasonló lefutásúak.

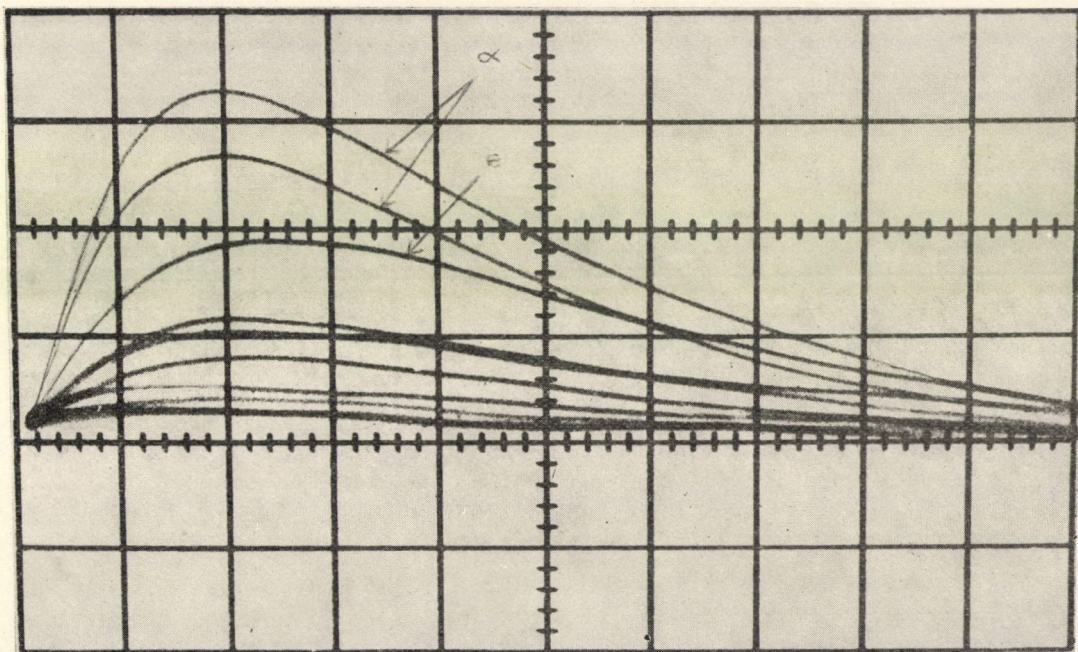
Tekintettel arra, hogy az impulzusok integrálása a berendezés holtidejének növekedésével jár, az esetleges túlterhelés csökkentése végett az integrálás mellett egyidejű differenciálást is megpróbáltunk alkalmazni.

A fentiek alapján a továbbiakban megvizsgáltuk: 1. Az impulzusok integrálásának és egyidejű differenciálásának milyen hatása van a jelalak diszkriminálásra. 2. Hogyan változik az egyes részecskék között a szeparáció, mint az integrálás és differenciálás függvénye. 3. Optimálisan formált (integrált és differenciált) jeleknél hogyan alakul a szeparáció az energia függvényében.

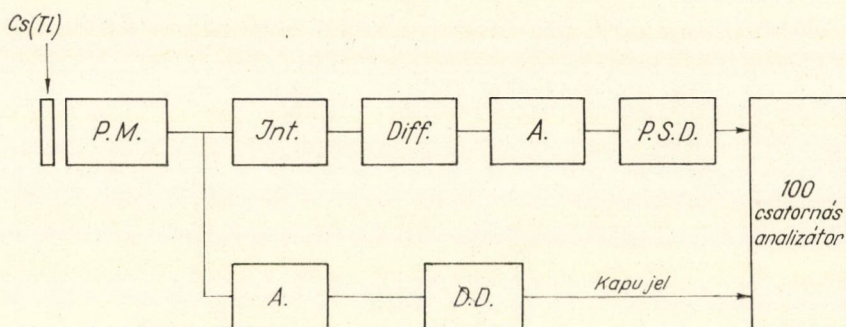
Mérési körülmények

Méréseinket $\text{Th}(B + C + C')$ radioaktív preparátum segítségével végeztük, az alfa-részek energiáját levegőben való fékezéssel csökkentettük annyira, hogy az ugyancsak jelenlevő gamma- és béta-részek energiatartományába essen. Proton forrásként vastag polietilén radiátorból Po—Be neutronforrás neutronjai által meg lökött protonok szolgáltak.

A mérőberendezés blokk-sémáját a 2. ábra szemlélteti. A fotoelektronsokszorozó (PM) jeleit integráló, és differenciáló egységen át vezetve felerősítettük (A), majd



1. c) ábra. CsJ(T1) esetén integrálással a jelalakban észlelt hullámosság megszűnt. Az alfa-jel me-redekebb, mint az elektronok jelei.



2. ábra. A mérőberendezés bloksémája PM fotoelektronsokszorozó jeleit Int. integráló, Diff. differenciáló és A erősítőn keresztül PSD jelalak diszkriminátorba vezetjük, ahol az eredeti impulzus emelkedési idejével arányos amplitúdójú jeleké alakítjuk, amit 100 csatornás analízátorral analizálunk. Az analízálás az A erősítő és DD differenciál diszkriminátor által kiválasztott energiánál történik.

a már korábban használt [4] „base line cross over” típusú impulzusalak diszkrimináló berendezéssel (PSD) analizáltuk. Az impulzusalak diszkriminátor kimenetén egy impulzus amplitúdó spektrum jelenik meg, ahol az egyes impulzusok amplitúdója, a fotoelektronsokszorozó kimenetén megjelenő impulzusok emelkedési idejétől — ezen keresztül a részecske fajtájától függ. Egy másik csatornában megfelelő erősítés után (A), DD diszkriminátor segítségével a teljes energiatarományból egy szűk részt kivágtunk, s ezzel kapuztattuk a 100 csatormás amplitúdó analízátort. Így módunkban volt a szeparációt az energia függvényében vizsgálni.

Mérési eredmények

Vizsgálataink során a jelformálás eredményeként jelentős javulást tapasztaltunk az egyes részek elválaszthatóságában.

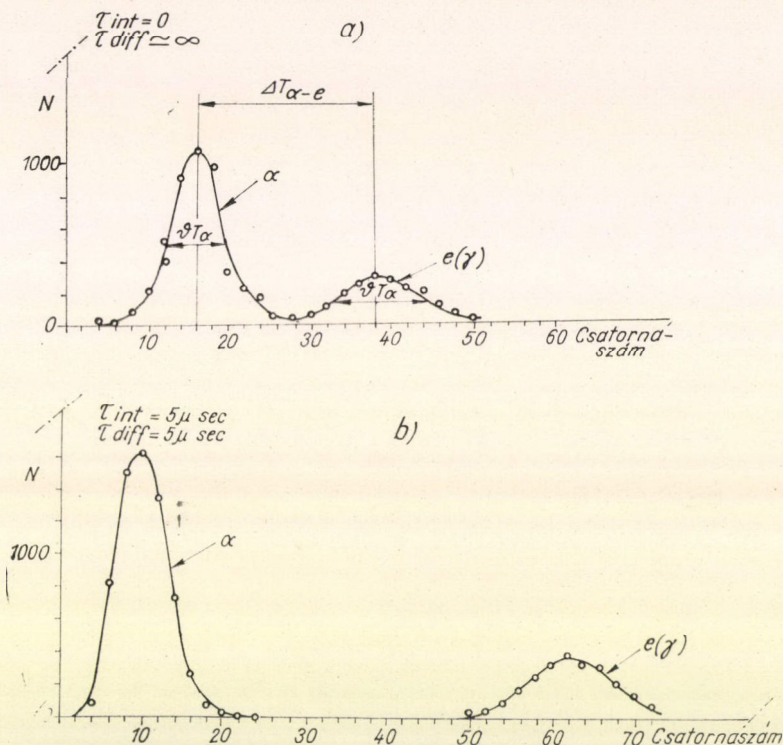
A 3. ábrán látható, hogy 1 MeV-es energiánál az alfák az elektronoktól hogyan választhatók el a) formálatlan és b) 5 μ sec-al formált impulzusok esetén. A 3. ábra jelöléseit felhasználva bevezetjük a szeparációs tényezőt $s = \frac{\Delta T_{\alpha-e}}{9T_{\alpha}}$. Ennek értékeit

kimérve az integráló időállandó függvényében paraméternek a differenciáló időállandót használva, a 4. ábrán látható görbesereget kaptuk. A mérési eredmények alapján 5 μ sec-nál nagyobb időállandójú integrálást alkalmazni nem érdemes, mivel ezután a szeparáció állandó értéket vesz fel. Ugyanakkor legalább 5 μ sec-os differenciálást alkalmazni ajánlatos, mivel ez a berendezés holtidejét csökkenti, a szeparációban viszont lényeges romlást nem eredményez.

Az 5. ábra az energia függvényében szemlélteti, hogy a különböző részecskék: alfák, protonok, elektronok milyen félértékszélességet mutatnak és milyen távolságra fekszenek egymástól. Az ábrán összehasonlítás céljából a korábbi (4), formálatlan impulzusok esetén kapott eredményeket is feltüntettük. Jól látható, hogy míg formálatlan impulzusok esetében (szaggatott vonal) az elektronok benyúlnak a protonok tartományába, 5 μ sec-os integrálás után (folytonos vonal) messze el-

távolodnak attól. Viszont a protonok és alfa-részek tartománya közötti viszony lényegesen nem változik.

Mivel tapasztalatunk szerint az impulzusok integrálása és egyidejű differenciálása a különböző nukleáris részecskék szeparációja szempontjából előnyösen használható, felmerül a kérdés, nem érinti-e az impulzusok ilyenképpen való for-



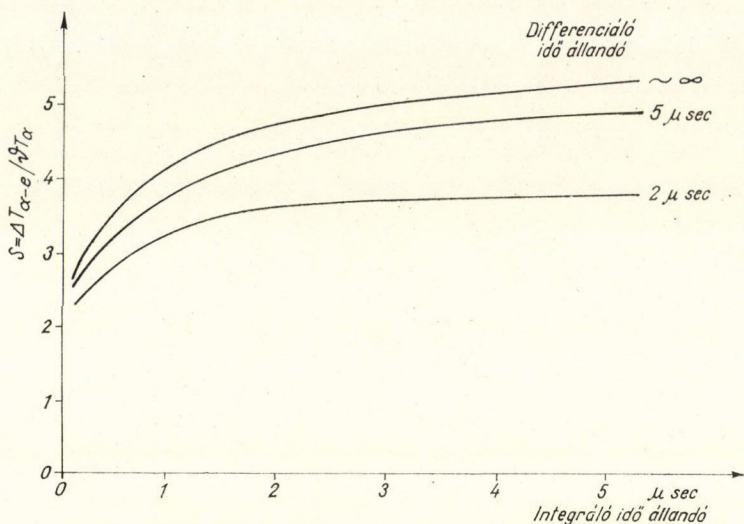
3. ábra. 1 MeV-es energiájú alfa-részek és elektronok szétválasztása a jelek emelkedési ideje alapján a) formálatlan és b) 5 μsec -al integrált és 5 μsec -al differenciált jelek esetén

málása az energetikai viszonyokat (felbontóképesség). E célból a CsJ(Tl) jeleit a fenti formálás után energetikai szempontból is megvizsgáltuk, s a kapott eredmények szerint az energia felbontóképességben változás nem mutatkozott.

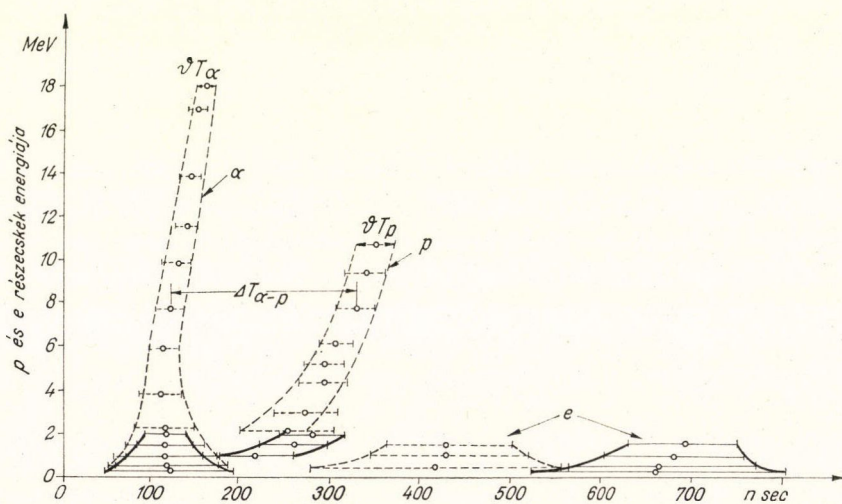
A gyakorlati munkában a kapott eredmény igen hasznos, mert eddig különösen a nagy energiájú protonokat az elektronoktól elválasztani kétdimenziós analízátor nélkül igen nehézkes volt. Most viszont egy differenciál diszkriminátor segítségével a kívánt részecske fajta egyszerűen kiválasztható.

A fenti módon tökéletesített jelalakdiszkrimináló kört az Intézetben épülés alatt álló töltött részecske teleszkópban hasznosítottuk, amely (n, p) ill. (n, α) reakciók vizsgálatára szolgál 14 MeV körüli neutron energiáknál. A teleszkópban energiamérésre és részecske identifikálásra CsJ(Tl) kristályt alkalmaztunk.

A tökéletesített impulzusalak diszkrimináló kör működésének demonstrálása végett felvettük a teleszkóppal egy vékony polietilén radiátorból 14 MeV-es neutronok által meglökött protonok energiaspektrumát, formálatlan, ill. a fentiek szerint formált impulzusok esetén.

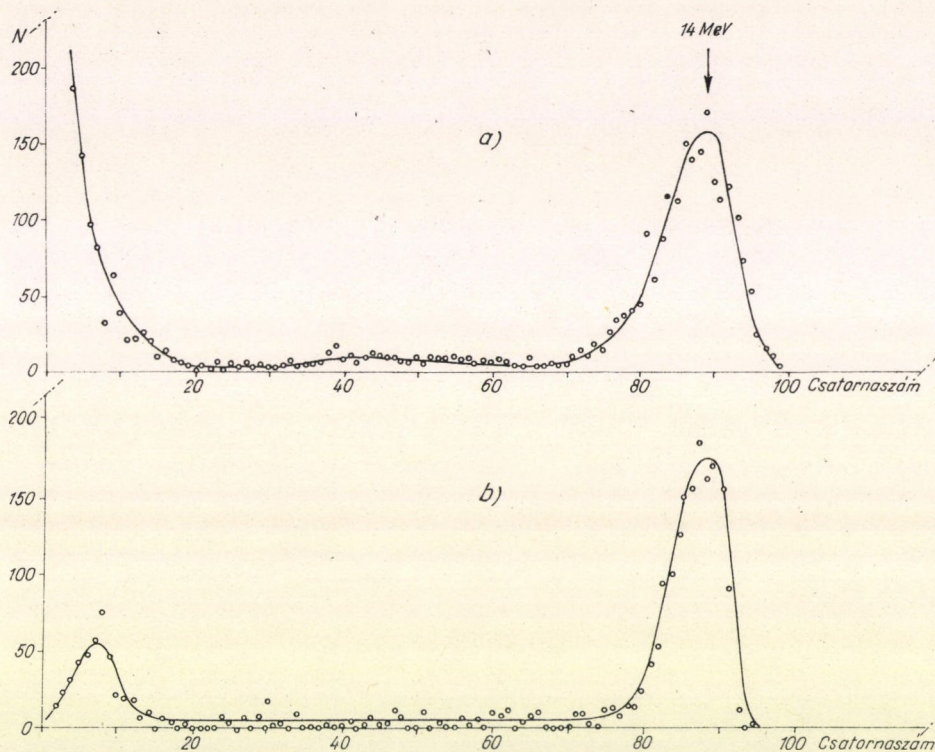


4. ábra. Szeparáció 1 MeV-es alfa-részek és elektronok között az integráló időállandó függvényében. Paraméter a differenciáló időállandó.



5. ábra. Különböző részecskék elválasztása az energia függvényében, az impulzusok formálása nélkül (szaggatott vonal) és 5 μsec-os integrálás és differenciálás után (folytonos vonal). Az egyes sávok szélessége adott energiánál a 3. ábrán látható Gauss-görbék szélességének felel meg.

A 6a ábrán látható spektrumban — mely a formálatlan impulzusok esetének felel meg — az alacsony energiák tartományában a nagy impulzusszám abból ered, hogy a tökéletlen részecske elválasztás miatt itt még a háttér elektronjai benyúltak a protonok tartományába. A 6b ábra spektruma a javított módszerrel történő



6. ábra. Polietilén radiátorból 14 MeV-es neutronok által meglökött protonok energiaspektruma teleszkóppal felvéve a) formálatlan, b) 5 μ sec-al integrált és differenciált impulzusok esetén. Az elektronok az utóbbi esetben teljesen ki vannak szűrve.

részecske szeparációnak felel meg. Itt már kiszorultak az elektronok a proton-tartományból. Az alacsony energiájú csúcs itt a (D + D) reakcióból eredő neutronok által meglökött 3 MeV-es protonokhoz rendelhetők.

Végül köszönetünket fejezzük ki dr. Szalay Sándor akadémikusnak, az intézet igazgatójának a munka támogatásáért és a kitűnő munkafeltételekért.

IRODALOM

1. R. B. Owen, IRE Trans. NS. 9, no. 3, 285, 1962.
2. A. E. Souch and D. R. Sweetman, Rev. Sci. Instr. 29, 794, 1958.
3. Gy. Máthé and B. Schlenk, Nucl. Instr. and Meth. 27, 10, 1964.
4. R. Fülle, Gy. Máthé and D. Netzband, Nucl. Instr. and Meth. 35, 250, 1965.

NEUTRONLASSÍTÁSON ALAPULÓ EGYENLETES ÉRZÉKENYSÉGŰ NEUTRONFLUXUS-MÉRŐK

MAKRA ZSIGMOND

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

1. Bevezetés. A fluxusmérési módszerek áttekintése.
 - 1.1 Fluxusmeghatározás forráserősség-mérés útján.
 - 1.1.1. Kísérő-részecske módszer.
 - 1.1.2. Maradék aktivitás módszer.
 - 1.1.3. Tér-integrálásos módszer.
 - 1.2. Energiafüggő fluxusmérési módszerek.
 - 1.2.1. Hidrogén töltésű proporcionális számláló.
 - 1.2.2. Proton-radiátoros proporcionális számláló.
 - 1.2.3. Homogén ionizációs kamra.
 - 1.2.4. Magfizikai emulzió.
2. A Hanson—McKibben-féle egyenletes érzékenységu fluxusmérő.
 - 2.1. A Hanson—McKibben-féle „Long Counter” elve.
 - 2.2. A termalizálódott neutronok hely-eloszlása, effektív homlokfelület mélység.
 - 2.3. Nagyenergiás érzékenység.
 - 2.4. Kisenergiás érzékenység.
 - 2.5. Az érzékenységi görbe „finomszerkezete”.
 - 2.6. Irányérzékenység, árnyékolás.
 - 2.7. Dózismérő „Long Counter”.
 - 2.8. A „Precíziós Long Counter”.
3. Irányfüggetlen fluxusmérő gömb.
4. 4π neutrontektorok.
 - 4.1. Grafit moderátoros 4π detektorok.
 - 4.2. Parafin moderátoros 4π detektorok.
5. Gyakorlati adatok.
6. Irodalomjegyzék.

1. Bevezetés. A fluxusmérési módszerek áttekintése

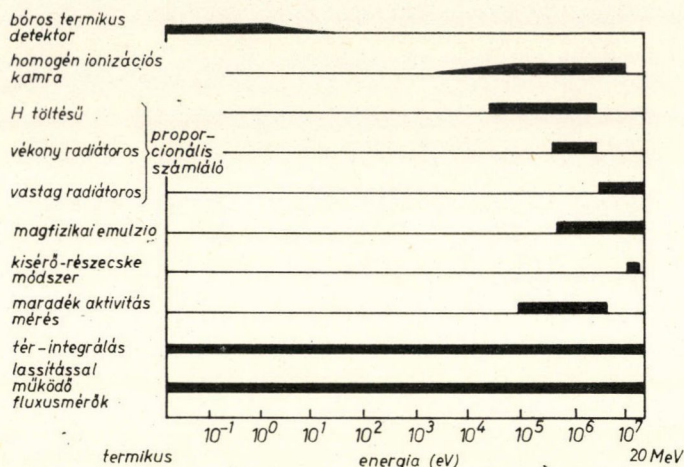
A neutronfluxus meghatározás a kísérleti neutronfizikában gyakran felmerülő feladat, ami különféle elveken alapuló, rendkívül változatos kivitelű eszközökkel oldható meg.

A fluxusmérési módszereket több szempont szerint csoportosíthatjuk. Soknál a neutron-energia pontos ismeretére van szükség. Sok szempontból előnyösebbek az olyan eljárások, amelyeknél a neutron-energiát nem (illetve csak egészen hozzávetőlegesen) kell ismernünk. Ez utóbbiaknak közös jellemzője, hogy a neutronokat először lelassítjuk és a termalizálódott neutronokat detektáljuk. A következőkben a különféle eljárások rövid áttekintése után az utóbbi csoporttal foglalkozunk részletesen, ezekből is csak a közvetlenül fluxust mérő eszközökkel, a lassításon alapuló forráserősség-meghatározást csak a bevezető áttekintésben érintjük.

Energiafüggetlen fluxusmérőket ismeretlen vagy a kísérlet folyamán erősen változó energiájú neutronok detektálásánál kell alkalmaznunk. Az előbbire példa a védőrétegen átjutott neutronok fluxusának meghatározása, az utóbbira a negatív reakcióhőjű neutrontermelő magreakciók vizsgálata a küszöbenergia tartományában.

1. TÁBLÁZAT

Különféle fluxusmérési eljárások energiatartománya.



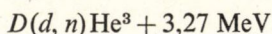
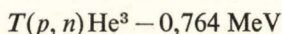
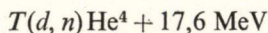
Cikkünkben nem tárgyaljuk a diffúz neutron térben (reaktor belsejében, lassító közegben) történő fluxusmérés kérdéseit, hanem csak a szabad térben („nyaláb geometriánál”) való fluxusméréssel foglalkozunk. Az ilyen jellegű fontosabb fluxusmérési eljárások energiatartományát az 1. táblázatban tüntettük fel.

1.1. Fluxusmeghatározás forráserősség-mérés útján

Az N hozamú neutronforrástól r távolságban, izotróp fluxuseloszlás esetén, a fluxus $\Phi = 4\pi r^2$. Ha a neutronok eloszlása anizotróp, akkor ennek megfelelő korrekciót kell alkalmazni. A gyakorlati esetek nagy részében az eloszlás jó közelítéssel izotróp, vagy a szögeloszlás ismert, így a forráserősség ismeretében a fluxust meg tudjuk határozni.

1.1.1. Kísérő-részecske módszer

Olyan magreakcióknál, ahol minden neutronnal együtt töltött részecske is keletkezik az utóbbiak megszámlálásával a neutronhozam meghatározható. Ezt a módszert elsősorban gyorsítóval létrehozott reakcióknál szokták alkalmazni. Ilyenek pl. a



reakciók. Az első reakciónál az α -részecskék kényelmesen megszámlálhatók, a másik kettőnél azonban a He^3 magok és a bombázó részecskék energiája között a különbség kicsi, ezért a kísérő részecskék nehezen különíthetők el a szórt bombázó részecskéktől, ezért a módszer leginkább csak a $T(d, n)\text{He}^4$ reakciónál használatos [1].

1.1.2. Maradék aktivitás módszer

Egyes neutrontermelő reakcióknál a céltárgy-mag a neutron kilépése után radioaktív lesz. A céltárgy aktivitásának megméréseével így a teljes neutronhozam meghatározható. Ezt az eljárást a $\text{Li}^7(p, n)\text{Be}^7$ reakciónál használják. A keletkezett Be^7 felezési ideje 53 nap, abszolút aktivitása gamma-sugárzás detektálással pontosan és viszonylag egyszerűen meghatározható [2].

1.1.3. Tér-integrálásos módszer

Ennél az eljárásnál a neutronforrást vizeskádba merítjük és a lelassult neutronok által indukált aktivitást határozzuk meg. Végtelen moderátorban a forrásból kilépő és a moderátorban elnyelődő neutronok száma azonos. Véges méretű kádnál — már nem túlságosan nagy méreteknél is — a neutron kiszökés kicsi, és ennek hatása, valamint a kiszökés energiafüggéséé is korrekcióba vehető. Megfelelő detektoranyagnál az aktiválás hatáskeresztmetszete is alig függ a forrás-energiától, így a módszer igen jó közelítéssel energiafüggetlen.

A mérésnél az egész térre kell integrálni a neutron fluxust, ezt vagy a detektor (pl. Au fólia) mozgásával érhetjük el, vagy a vízhez Mn-só oldatot keverünk és a Szilárd—Chalmers reakcióval kivált aktív mangánt kiszűrjük, vagy az összekevert oldatból vett minta abszolút aktivitását mérjük meg. A módszer pontossága 5%, igen nagy gonddal végzett méréseknél 1—2% [3], [4].

1.2. Energiafüggő fluxusmérési módszerek

A számos, különféle technikai kivitelű detektor a következő elvekre vezethető vissza. 1. A neutronok által meglökött ionizáló részecskék számlálása. 2. A neutronok által meglökött részecskék átlagáramának mérése. 3. A neutronok által keltett magreakció folyamán kilépő töltött részecskék detektálása.

A használt *detektorok* sokfélék lehetnek: proporcionális számláló, impulzusvagy áramüzemű ionizációs kamra, szcintillációs számláló, magfizikai emulzió, ködkamra, buborékkamra stb. Gyakran használnak több darab — esetleg különböző típusú — detektorból összeállított kombinációt.

A fluxusmérőkre inkább a neutron-anyag kölcsönhatásban résztvevő konverter (a neutron hatására jól detektálható részecskét adó közeg) milyensége a jellemző, semmint a konverterben keltett részecskét érzékelő detektor típusa. A konvertert az anyagi minőség, sűrűség, geometriai viszonyok (vastagság, a detektálásnál kihasznált térszög), stb. jellemzi. A konverterből kilépő összes részecskét nem lehet detektálni, hanem vagy csak az E_0 energia küszöbnél nagyobb energiájúakat, vagy csak az Ω térszögon belül érkezőket.

Ha a neutron-konverter és a detektálási térfogat egymással megegyezik, küszöbenergia fölött lehetséges a detektálás. Ilyen típusú detektorok a következők: ho-

mogén ionizációs kamra, hidrogén töltésű proporcionális számláló, plastik szcintillációs számláló, magfizikai emulzió, a buborék- és a ködkamra stb.

A kétféle funkcionális elem egymástól térben elkülöníthető, ilyenkor inkább a detektált szekunder részecske térszöge rögzített; pl. különféle protonradiátoros számlálók és számláló teleszkópok, vagy külső radiátoros magfizikai emulzió.

A két megoldás között gyakran nem lehet éles határt vonni, hanem többé-kevésbé átfedik egymást. Szigorú kategorizálás vagy részletes felsorolás helyett utalunk a bő irodalomra [5], [6], [7], és a következőkben csak néhány fontosabb példát említünk, az energiatünetlen fluxusmérőkkel való összehasonlítás céljából.

1.2.1. Hidrogén töltésű proporcionális számláló

Előnye az alacsony alsó energiahatár: 30 keV. 2—3 MeV energia fölött a meglokkott protonok hatótávolsága eléri a cső méreteit, ennél nagyobb energiákon célszerűbbek a radiátor-fóliás számlálók. Pontos fluxusméréshez elsősorban a „vég hatást” és a „fal hatást” kell kiküszöbölni [6].

1.2.2. Proton-radiátoros proporcionális számláló

Két változatát kell megkülönböztetni: a „vékony” és a „vastag” radiátoros proporcionális számlálót. Az előbbinél a radiátor-fólia vastagsága $100 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ nagyságrendű vagy vékonyabb, energia tartománya 0,5—2,0 MeV. Differenciális impulzus-amplitúdó spektruma téglalakú, kedvezőbb, mint a hidrogén töltésű cső kis amplitúdók felé erősen emelkedő spektruma. Egyes esetekben detektorként ionizációs kamrát is használnak.

A vastag radiátor fóliát 3 MeV neutron-energia fölött használják. A detektorba csak egy szűk diafragma által kiválasztott protonokat engednek, így a „hasznosított” protonok energiája közel azonos. Gyakran koincidenciába kapcsolt több proporcionális számláló, vagy proporcionális csövek-szcintillációs számláló összeállítású teleszkóp formájában alkalmazzák. Ilyen kivitelben neutron energia mérésre is alkalmas.

A hidrogén töltésű és radiátor fóliás fluxusmérők pontossága — gondos kivitel mellett — elérheti a 2—4%-ot [6].

1.2.3. Homogén ionizációs kamra

A homogén ionizációs kamra (a fal és a töltőgáz atomi összetétele azonos) árama a neutron-energiától függetlenül a kamrában elnyelt dózissal arányos, tehát neutron-dóziméterként használható. A neutrontózis-fluxus összefüggés alapján fluxusmérésre is alkalmas [5]. Hátránya a gamma-sugárzás iránti érzékenység, amit egy második kamrával lehet figyelembe venni, a korrekció azonban nagyobb gamma/neutron dózisintenzitásnál pontatlan. A homogén ionizációs kamrával [8] és [9]-ben részletesen foglalkoztunk, érdemes viszont e helyen — a szakirodalomban általában nem tárgyalt — alsó energiahatárára kitérni.

Ha a neutronok E_n energiája meghaladja a töltőgáz E_i ionizációs energiáját, akkor a kamra ad jelzést. Mivel a protonok energia-spektruma 0-tól E_n -ig terjed, a hű dózisméréshez $E_n \gg E_i$ szükséges. $E_n > 0,5$ keV esetén az emiatt fellépő hiba $\sim 1\%$. Ennél nagyobb, 10 keV nagyságrendű energiáknál is azonban az átlagos méretű kamrák túl kicsi áramot adnak, nagy energiákon pedig különféle küszöb-

reakciók zavarnak. (Főleg a kompenzáló-kamránál.) Mindezeket figyelembe véve homogén ionizációs kamrát kb. 0,5—10 MeV között érdemes fluxusmérésre használni.

A Hurst-féle számláló — bár proporcionális üzemmódban működik — az ionizációs kamra tökéletesítésének tekinthető, ugyanis impulzusszám-impulzusamplitúdó szorzatot, vagyis dózist mér. Előnye a kiváló gamma-diszkrimináció, valamint az, hogy abszolút dózis-számláló [9], [10], [11], [12]. A Hurst-detektor közvetve — dózisintenzitás-fluxus átszámítással — fluxusmérésre is használható.

1.2.4. Magfizikai emulzió

A magfizikai emulziót inkább spektrummérésre szokás használni és a fluxus mintegy „melléktermékként” adódik. A neutronok vagy magát az emulziót érik, vagy az emulziótól távolabb elhelyezett radiátor fóliát. Az utóbbi esetben természetesen az összeállítást vákuumkamrába kell helyezni. Pontossága korlátozott, 10—20%-nál ritkán jobb [13], [14].

Számos más eljárás ismeretes még, pl. termikus neutronok fluxusának mérésére BF_3 töltésű vagy bór bevonatú ionizációs kamrák és proporcionális számlálók, bór tartalmú szcintillátorok, gyors fluxus mérésre pedig plasztik szcintillátor. Ezeket — mivel általánosan ismertek — itt nem tárgyaljuk, hanem rátérünk a lassítással működő fluxusmérők részletes ismertetésére.

2. A Hanson—McKibben-féle egyenletes érzékenységu fluxusmérő

Az első, széles energiatartományban energiafüggetlen fluxusmérőről Hanson és McKibben számolt be 1947-ben [15]. A detektor korábbról származik, Los Alamosban dolgozták ki a háború éveiben, azonban ismertetésére akkor nem kerülhetett sor.

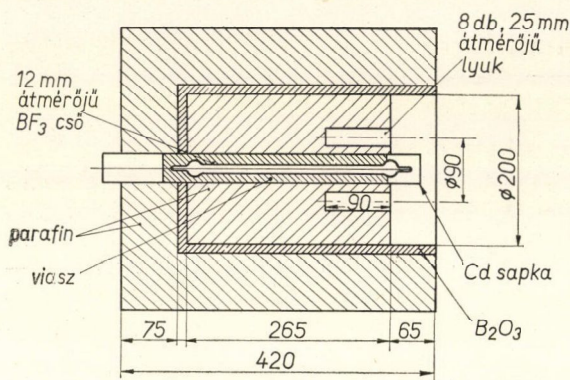
Az első kísérleteknél 20 cm hosszú, bór bevonatú ionizációs kamrát használtak, vele azonos hosszúságú, 17 cm átmérőjű paraffin burkolattal. Az összeállítás érzékenysége 0,4—2,0 MeV között állandó volt. (Erről a kísérletről részletes leírás nem jelent meg, csak [15]-ben említik.)

2.1. A Hanson—McKibben-féle „long counter” elve

Az ionizációs kamrás fluxusmérő után Hanson és McKibben proporcionális csöves változatot szerkesztett. Ennél hengeres paraffin tömb tengelyében helyezkedik el a BF_3 töltésű számlálócső (1. ábra). A detektort hossz tengelyével a sugárforrás felé irányozták. 10 keV—3 MeV között 10%-on belül egyenletes érzékenységet a következő alapon tudtak elérni.

A gyors neutronoknál mind a szabad úthossz, mind a termalizálódáshoz szükséges ütközések átlagos száma nagy, ezért mélyen a tömb belsejében termalizálódnak. A termikus neutronok szabad úthossza már kisebb, így a termalizálódott neutronok kiszökési valószínűsége kicsi. Megváltozik a helyzet $E < 100$ keV energiájú neutronok esetén; ezek a homlokfelülethez közel termalizálódnak és így könnyebben kiszökhetnek a paraffinból. Ezt csak részben ellensúlyozza, hogy kis energiánál a termalizálódáshoz szükséges átlagos ütközési szám kevesebb.

A kisenergiás érzékenység megnövelésére a homlokfalba nyolc darab (2,5 cm átmérőjű, 9 cm mély) lyukat fúrtak. A lyukakba bejutó lassú neutronok már elhanyagolható valószínűséggel szóródnak vissza a tömbből, ugyanekkor a tömb tömege nem csökken sokat (a lyukak homlokfelülete/tömb homlokfelület viszony kicsi),



1. ábra. A Hanson—McKibben-féle „long counter” metszete (Árnyékolt változat)

szempontból az árnyékolt és árnyékolatlan megoldás között erős eltérés van, a külső parafin hengerből a centrum felé szoródó neutronok ugyanis közel 100% valószínűséggel jutnak át a bór abszorbens rétegen.

A következőkben részletesen megvizsgáljuk a detektor energiamevetését befolyásoló tényezők hatását.

2.2. A termalizálódott neutronok hely-eloszlása, effektív homlokfelület mélység

Fluxusméréshez fontos ismernünk a detektor effektív homlokfelületének helyét*. Ez a geometriai homlokfelület mögött c mélységben helyezkedik el. Az energia növekedésével c értéke is nő, ezért ha c energiafüggését nem vesszük figyelembe, nagyobb energiákon a valódinál kisebb érzékenységet kapunk.

c kísérleti meghatározásához a környezetből szóródott neutronok háttérével helyesbített számlálási sebesség négyzetgyökét ábrázoljuk az r forrás-detektor távolság függvényében. Így egyenest kapunk, mely az r tengelyből kimetszi c -t.

Elméletileg a probléma a következő módon tárgyalható [16]. A termikus neutronok hely-eloszlását a moderátor tömbben maximummal bíró, majd exponenciálisan eső görbe írja le. Az energia növekedésével a maximum helye hátrább tolódik és a görbe lecsengése lankásabb lesz.

Az eloszlást elméletileg és — 13 cm átmérőjű polietilén hengerre — kísérletileg is meghatároztuk [17], (2. ábra). A hely-eloszlás görbék centroidjának helyét vettük az effektív detektálási mélységnek. Az így nyert görbét más szerzők elméleti és kísérleti adataival, valamint egyéb saját adatokkal együtt a 3. ábrán mutatjuk

* Valamely (nagy kiterjedésű) detektor effektív homlokfelülete az a sík, amelyben el kell helyoznünk a detektorral egyenértékű pontszerű detektort.

a nagyenergiás érzékenység változatlan marad. Megjegyzendő, hogy a termikus detektort befogadó furatnak már eleve ilyen hatása van.

Ha a termikus neutronok közvetlenül elérhetnék a proporcionális csövet, akkor ezekre az érzékenység túl nagy lenne, ezért a detektor végét kadmium sapka fedi.

A MeV tartományban az energia növekedésével nő a tömbből kiszökő neutronhányad, ezért a parafintömb hosszának és átmérőjének helyes megválasztásával a nagyenergiás érzékenység egyenletessé tehető. Ebből a

be. A különböző adatok közötti nagy eltérésre nehéz magyarázatot adni. Úgy tűnik, hogy az újabb eredmények már elég jól egyeznek egymással.

2.3. Nagyenergiás érzékenység

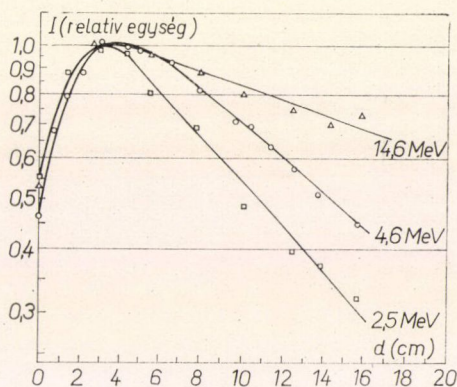
Az 1–16 MeV közötti érzékenységet több szerző vizsgálta. Draper különféle átmérőjű, végtelen hosszú paraffin tömbben különböző mélységben elhelyezett „szürke” detektor érzékenységének energiafüggését számította ki [18], [19]. Adatai az $1 \text{ MeV} < E < 10 \text{ MeV}$ tartományban jól egyeznek a mérésekkel, kis energián — mivel homlokfalba fűrt lyukakat nem tételezett fel — a görbéje erősen esik (4. ábra). A paraffin tömb átmérőjének az energiafüggésre gyakorolt hatását mutatják Hanson és McKibben görbéi is (5. ábra).

Az optimális lassítótömb-átmérő meghatározásánál két szempontot érdemes figyelembe venni. Az egyik a lehető legegyszerűsebb érzékenység, ehhez a $D \approx 20 \text{ cm}$ a legmegfelelőbb. A másik szempont a jó detektálási hatásfok. Ez az átmérő növelésével nyilvánvalóan nő, azonban a felület-egységre vonatkoztatott (fajlagos) hatásoknak az energiától függően más-más értékeknél maximuma van. Mint Borresen és munkatársai méréséből látható [20] a 10 cm-es sugár ebből a szempontból is megfelelő (6. ábra).

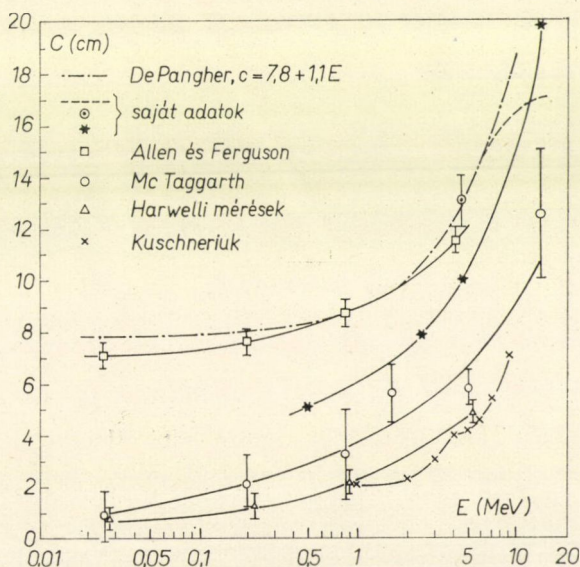
Nyilvánvaló, hogy a termikus neutron detektor átmérőjének növelésével illetve több detektor alkalmazásával az érzékenység fokozható. Öt detektorral ellátott „long counter”-ról Schmitt és Cook tesz említést [21], azonban részletes, adatokat nem közöl.

Az érzékenység energiafüggését a termikus neutron számláló helyzete és mérete is befolyásolja. Ha a számlálósó nem nyúlik előre a paraffintömb homlokfaláig, az érzékenység kis energiákon csökken (Draper számításai és szovjet szerzők adatai, l. később).

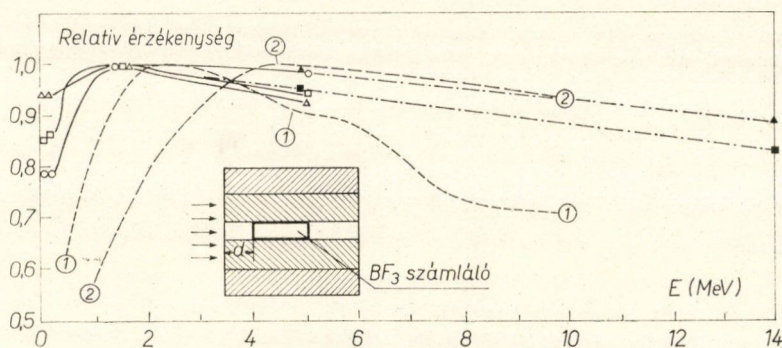
A termikus detektor átmé-



2. ábra. Polietilén tömbre eső gyors neutron nyaláb által létrehozott termikus neutron eloszlások ($d=0$ a tömb felszíne).



3. ábra. A „long counter” effektív homlokfelület mélységének energiafüggése.



4. ábra. A termikus neutron számláló helyzetének és az árnyékolásnak a hatása a „long counter” energiamenetére

① és ② számított görbe [19]:

① $d = 0$ cm, árnyékolatlan

② $d = 6$ cm, árnyékolt

Folyamatos görbe: Draper adatai [18]:

\triangle : $d = 0$ cm

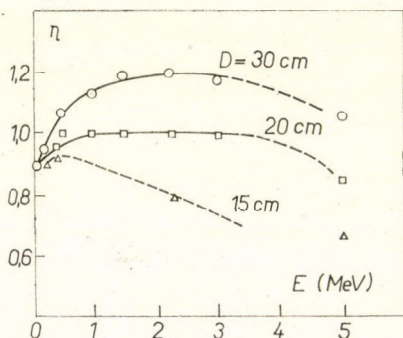
\square : $d = 2,5$ cm

\circ : $d = 7,5$ cm

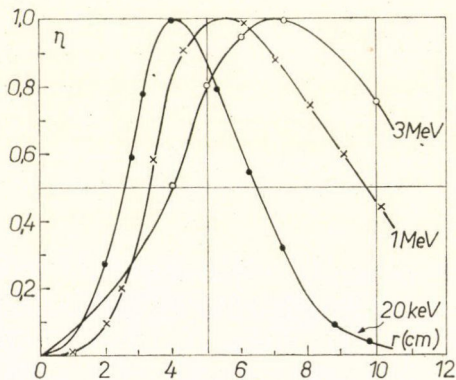
Pont-vonás görbe: Vacet et al. adatai [22]:

\blacktriangle : $d = 0$ cm

\blacksquare : $d = 3$ cm



5. ábra. Különböző átmérőjű paraffin tömbbe helyezett BF_3 számláló energiatfüggése



6. ábra. A „long counter” homloklapfelület-egységre vonatkoztatott érzékenysége a paraffintömb sugárának függvényében, különféle neutron energiákra

rőjének növelése a következő hatással jár [22]. A detektálásnál hasznosított térfogat — első közelítésben — a detektor sugár és a diffúziós hossz összegével, mint sugárral vont hengerrel egyenlő. A „hatásos térfogat” elöl — a lyukak miatt — nagyobb, mint hátul. A detektor átmérőjének növelésével nő a hatásos térfogat is, de hátul a relatív növekedés nagyobb. A nagyobb energiájú neutronok hátrább detektálódnak, így az átmérő növelése emeli a nagyenergiás érzékenységet. (Ez a kép eléggé közelítő, pontos számításra nem alkalmas.)

2.4. Kisenergiás érzékenység

Vastag parafin tömb albedoja termikus neutronokra kb. 0,75 vizsont nagyobb energiákra, illetve vékony parafinrétegre lényegesen kisebb. Az érzékenységet a homlokfal geometriájával befolyásolhatjuk, erre a legismertebb megoldás a lyukak fúrása a számlálócső köré.

A lyukak méretének és elhelyezésének hatását *McTaggarth* vizsgálta [18], [23]. A lyukak mélységét 0–36 cm között változtatva azt találta, hogy 7,5–18 cm között az érzékenység nem függ a lyukmélységtől, ez alatt kisenergián, nagyobb mélységeknél pedig minden energián csökken az érzékenység.

A lyukkör átmérőjét 8,25 cm-ről 7,5 cm-re csökkentve, illetve 10 cm-re növelve az érzékenység menete 5–10%-ot romlott (25 keV–5 MeV között).

Mindkét mérősorozat tehát azt mutatta, hogy a *Hanson* és *McKibben* által használt paraméterek közel vannak az optimálshoz.

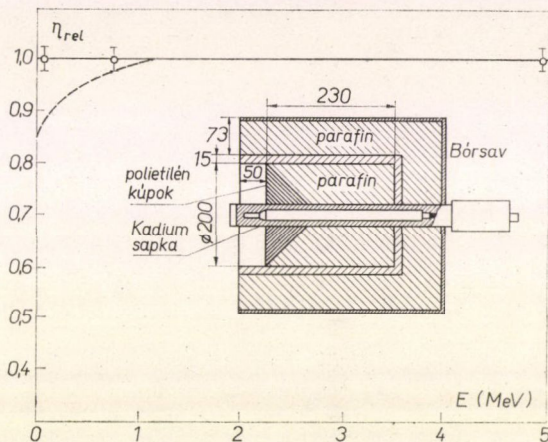
A lassú neutronokra fellépő ~20% érzékenység csökkenést *Vályi László* a következő megfontolás alapján szüntette meg [17], [24], [25], [26]. A homlokfalba lyukak helyett kúpot mélyített. Ez által az érzékenység kis energiákra kellőképpen megnőtt, de a lassító tömb megrövidülése folytán nagy energiára lecsökkent. A kúp nyílásába helyezett vékony paraffin kúp sorozat ezt a csökkenést jórészt kiegyenlítette, a lassú-neutron érzékenységet azonban — mivel a lapok albedója kb. tizede a tömbének — alig rontotta. A detektor metszeti rajza és érzékenysége a 7. ábrán látható.

Elképzeltető, hogy a lassú-neutron detektor hatáskeresztmetszetének menete hatással van a fluxusmérő energiamenetére. *Tochilin* és *Alves* az $1/v$ hatáskeresztmetszetű bór helyett In és Au fólia detektort használt [27]. A rendszer érzékenysége a 0,1–4,0 MeV tartományban nem változott. Ez az aktivációs detektoros megoldás nagy fluxusok mérésénél lehet előnyös.

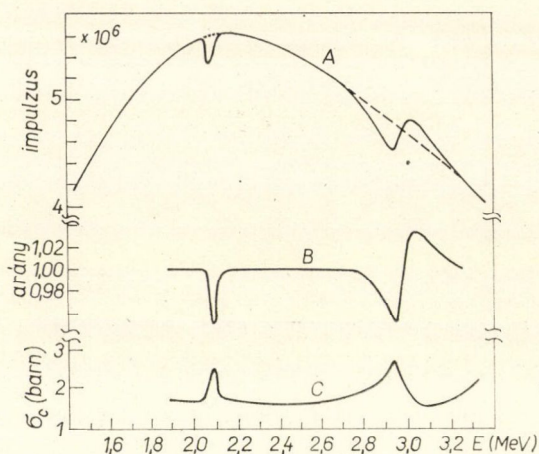
2.5. Az érzékenységi görbe „finomszerkezete”

Nobles, *Day* és munkatársaik mérésénél, 1953-ban vetődött fel először a gondolat, hogy a *Hanson*—*McKibben*-detektor érzékenysége a „sima” szakaszon belül is — bár kisméretű —, de igen meredek változásokat mutat [28].

A $T(p, n)He^3$ magreakció neutronhozamának mérésénél ugyanis, az energia változtatásának függvényében hirtelen változást észleltek. Arra a következtetésre



7. ábra. Koncentrikus kúppal módosított „long counter” metszeti rajza és energiafüggése



8. ábra. A „longg counter” érzékenységi görbéjének „finomszerkezete”. A: a T/p , n/He^3 magreakció mért neutronhozama, B: relatív hatásfok görbe (a mért és a kisímitott hozam görbe hányadosa), C: a szén teljes hatáskeresztmetszete

a detektorból kiszökő neutronhányadot növeli. A számítások az érzékenység csökkenésére 2–3%-ot adtak, ami a mért 5%-kal összegeztethető.

2.6. Irányérzékenység, árnyékolás

Mivel az érzékenység csak a detektor homlokára eső neutronokra egyenletes, fontos — különösen erősen diffúz sugárzási térnél — a detektor oldalát és hátsó

felületét árnyékolni. A szokásos árnyékolás: 75 mm vastag parafin és ezen belül 10–15 mm bórsav réteg. Többen próbálkoztak a védőréteg vastagságának növelésével, de igen jelentős súlynövekedés árán is csak mérsékelt eredményt sikerült elérni [20]. Antolkovič és munkatársai detektoránál 80 cm hosszú kollimátorral és kúpalakú védőréteggel néhány fokos szögfelbontást értek el és e mellett egyúttal az árnyékolási tulajdonságok is igen jók [29], (2. táblázat), azonban az összeállítás igen nagyméretű és súlyos. A mechanikai tulajdonságai miatt előnytelen bórsav helyett kadmium borítást is kipróbáltak, sőt az abszorbenst teljesen el is hagyták, és ez észrevehető változást nem okozott [27]. Ez azzal magyarázható, hogy a parafin henger védő hatását nem az abban lelassult neutronoknak a bórban való

2. TÁBLÁZAT

Az egyenletes érzékenységű fluxusmérő oldalirányú és szemközti érzékenységének viszonya különböző árnyékolóréteg vastagságokra és neutronenergiákra

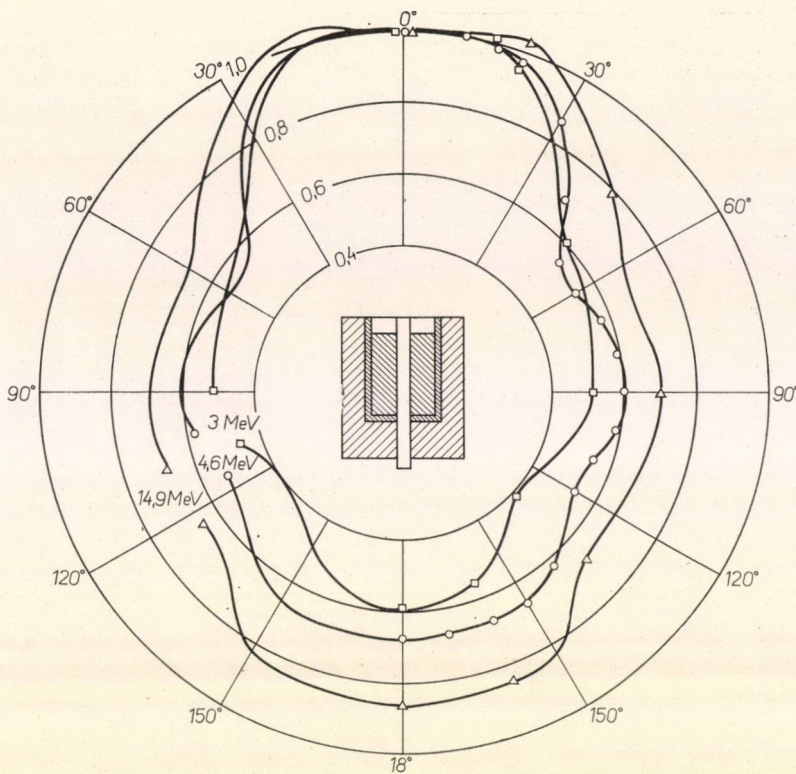
Árnyékolás vastagsága (mm)	Neutronenergia (MeV)		
	3,0	4,6	14,9
75	0,51 ¹⁾	0,60 ²⁾ 0,58 ³⁾	0,80 ¹⁾
195	0,15 ¹⁾	—	0,49 ¹⁾
~400	—	0,09— ⁴⁾ 0,13	—

¹⁾ Borresen et al.

²⁾ Makra Zs.

³⁾ Tochilin és Alves

⁴⁾ Antolkovič, Holmqvist, Wiedling



9. ábra. A „long counter” irányérzékenysége, három különböző neutronenergián mérve

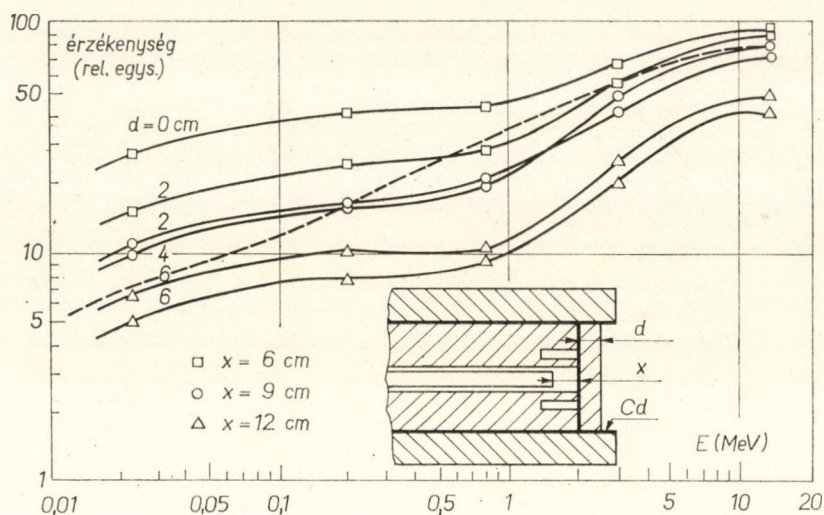
elnyelődése okozza, hanem a neutronok kiszóródása. Ha feltételezzük hogy — közelítőleg — minden neutron egyszer ütközik a védelemben, akkor a neutronoknak kb. a fele elkerüli a detektort. A 2. táblázat adatai szerint ez a közelítő kép 75 mm parafin vastagságra és 3—5 MeV energiára alkalmazható.

A 9. ábrán néhány, különböző energiára felvett irányérzékenységi görbét mutatunk be.

2.7. Dózismérő „long counter”

Mint az előzőekben már láttuk, ha a termikus neutron detektort a parafintömbben mélyebben helyezük el, a kisenergiás érzékenység csökken. Ez adta az ötletet, hogy ilyen úton (vagy még további módosításokkal is) próbálják megközelíteni az első ütközési testszövet dózis görbét, azaz a detektor ne fluxusra, hanem dózisra legyen egyenletes érzékenységu. Az ilyen detektor ezek szerint — legalábbis rendeltetését tekintve — nem illik a cikkünkben tárgyalt detektorok közé, kivitele szempontjából azonban — mivel a „Long Counter” egyik változata — ide kívánczik.

Amerikai szerzők az ilyen dózismérőnek több felhasználásáról számolnak be, de részletes adatokat nem közölnek [30], [31], [32]. A következőkben egy szovjet



10. ábra. A termikus neutron detektor hátrahúzásával és polietilén abszorbenssel módosított érzékenyséű „long counter” érzékenysége energiafüggése. A pontozott görbe mutatja az első ütközési dózist

konstrukciót ismertetünk [33]. Frid, Mirosnyikov és munkatársaik maximálisan 12 cm-ig hátrahúzott termikus detektorral és 0, 2, 4 és 6 cm vastag parafin tárcsával végeztek méréseket. Néhány eredményüket a 10. ábrán, ill. a 3. táblázatban közöljük. Mint ezekből kitűnik, összeállításuk ~ 20 keV és 14 MeV között jól használható, eléri a más rendszerű neutron-dózisintenzitás mérők pontosságát és emellett érzékenysége is elég nagy.

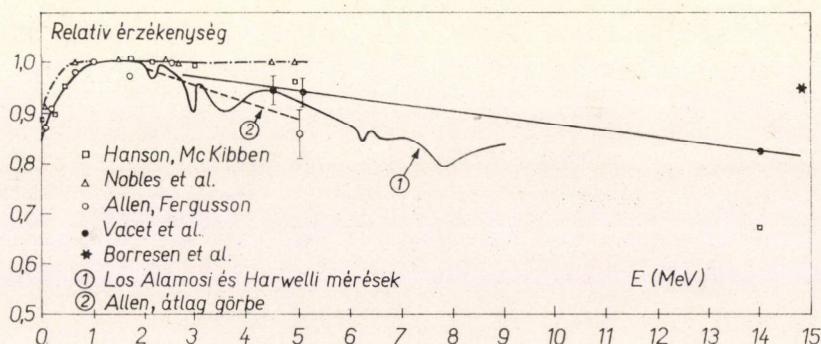
3. TÁBLÁZAT

A „dóзимérő Long Counter” érzékenysége az első ütközési test-szövetdózishoz viszonyítva

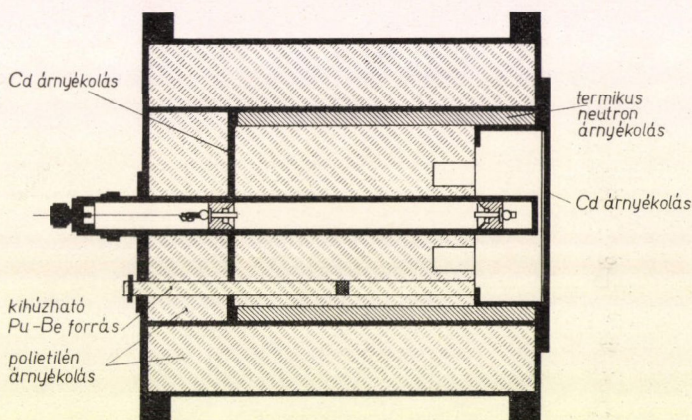
Termikus detektor mélysége x (cm)	Parafin vastagság d (cm)	Neutron energia (MeV)				
		24 keV	0,2	0,8	3,0	14
6	4	1,3	1,0	0,7	0,97	1,1
9	4	1,3	1,0	0,7	0,9	1,2
12	6	1,3	1,0	0,7	0,9	1,05

2.8. A „Precíziós long counter”

Hanson—McKibben fluxusmérőjének karakterisztikája igen sok — és az esetek nagy részében pontosan meg nem is határozható — paramétertől függ. Sem a parafin, sem a borsav nem jó szerkezeti anyag, alakjuk, sűrűségük megváltozhat, ami a berendezés jellemzőinek változását vonja maga után. A 11. ábrán összegyűj-



11. ábra. Különböző szerzők „long-counter” érzékenységi adatai.



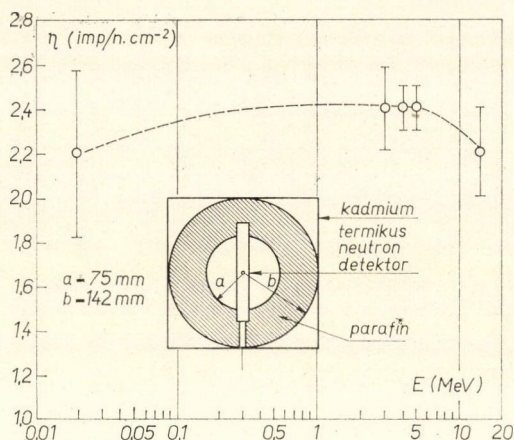
12. ábra. A „precíziós long counter” metszete (De Pangher).

tött érzékenységi görbék is ezt mutatják: a különböző szerzők adata között 10% eltérések is előfordulnak.

De Pangher „Precíziós Long Counter” konstrukciója [34] mentes ezektől a bizonytalanságoktól. Parafin helyett pontosan megmunkált polietilén tömböket, a fenéklap árnyékolásánál bórsav helyett kadmiumot használ, a számlálócsővel párhuzamos furatba pedig hitelesítő plutonium-berillium neutronforrás helyezhető. A fluxusmérő ez által igen pontosan reprodukálható, az így készített példányok érzékenysége egymással 1–2%-on belül megegyezik (12. ábra).

3. Irányfüggetlen fluxusmérő gömb

Gyakran — pl. sugárvédelmi méréseknél — előnyös az egyenletes irányérzékenységű detektor. A Frascatiban kidolgozott izotróp érzékenységű fluxusmérő [35], [36], [37], [38] 28,4 cm külső, ill. 15 cm belső átmérőjű gömb, belsejében BF_3 töltésű detektorral (13. ábra). A detektor irányérzékenysége $\pm 4\%$ -on belül állandó, ener-



13. ábra. A fluxusmérő gömb metszeti rajza és energiafüggése.

giafüggése 25 keV és 14 MeV között $\pm 10\%$ -on belül van. (~ 20 keV alatt az érzékenység erősen csökken, 0,5 eV alatt, a kadmium borítás miatt, gyakorlatilag nulla.)

A detektor effektív középpontja pontosan azonos a geometriai középponttal, ez különböző energiaszórású fluxusok mérésénél előnyös.

4. 4π neutrondetektorok

Az előzőekben tárgyalt egyenletes érzékenységű fluxusmérőket egyes alkalmazásokhoz több irányban is tovább kellett fejleszteni. A fontosabb megoldandó feladatok a következők: 1. Az érzékenység túl kicsi. Pontos fluxusméréshez a detektort a forrástól 1 méter nagyságrendű távolságra kell tenni, egyébként ugyanis a forrás-detektor távolság relatív hibája — az effektív középpont helyének bizonytalansága miatt — nagy lesz, továbbá az effektív középpont helyét és az érzékenység energiafüggését is befolyásolhatja a nyáláb divergenciája, ekkor viszont a detektor általában a teljes neutronhozamnak csak 10^{-2} – 10^{-3} részét fogja fel, hatásfoka 1% alatt van, így csak kb. minden 10^5 neutronból egyet észlelünk. Ez a túl kicsi hatások sok esetben (pl. kis hatáskeresztmetszetű küszöbreakciók vizsgálatánál) meg is hiúsíthatja a mérést. 2. Sok esetben a kísérlet folyamán a neutronok szögeloszlása erősen változik. Ilyenkor a fluxusmérő detektornak nem csak az energia változására, hanem a szögeloszlás változására is érzéketlennek kell lennie, vagyis a fluxust integrálnia kell a teljes 4π térszögre.

Az energiafüggetlenség mellett a neutronok szögeloszlásától független (legalábbis közel független) érzékenység és a nagy hatásfok a 4π detektorok jellemzője.

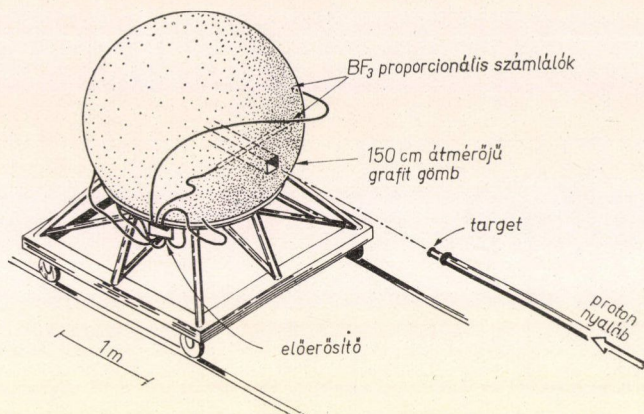
4.1. Grafit moderátoros 4π detektorok

Grafitban a termikus neutronok diffúziós hossza lényegesen nagyobb, mint parafinban, ezért grafit moderátornál könnyebb elérni, hogy a termikus neutron detektor helyén a fluxus az energiától függetlenül állandó legyen. Ugyanezen ok miatt viszont a detektor méretei is sokkal nagyobbak, mint parafin használata esetén.

Dorofeev és Dobrinyin megoldásánál $190\text{ cm} \times 190\text{ cm}$ alapterületű, 240 cm magas grafitgömb belsejében kialakított kocka alakú üregben elhelyezett neutronforrás sugárzását a grafitban egyenletesen elosztott bórt trifluorid töltésű csövek észlelték. Az egyenletes irányérzékenységet a csövek egyenletes elosztásával, az energiafüggetlenséget pedig a detektor-grafittal távolság megfelelő megválasztásával

val érték el. A rendszer érzékenysége 30 keV és 5 MeV között $\pm 2\%$ -on belül állandó volt [39].

R. L. Macklin detektora 150 cm átmérőjű gömbből áll. A neutronforrás (gyorsítócső) a gömb középpontjáig nyúlik be. A nyolc termikus-neutron detektor a gömb felszínétől átlagosan 8 cm-re helyezkedik el. A detektor képét a 14., az érzékenységet



14. ábra. Grafit gömb 4π számláló.

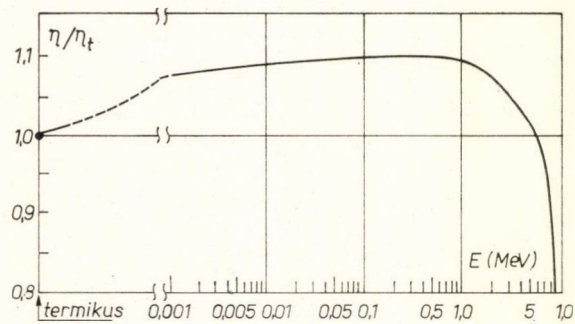
a 15. ábra mutatja. A detektor használhatóságára jellemző, hogy a $T(p, n)He^3$ magreakciónál, ahol 1,019 és 1,148 MeV proton energia között a neutronok kilépési szöge kisebb, mint 4π (és a jelzett energiatartományban igen erősen változik) a detektor érzékenység változásából csak 0,36% írható a neutron szögeloszlás változás terhére [40].

4.2. Parafin moderátoros 4π detektorok

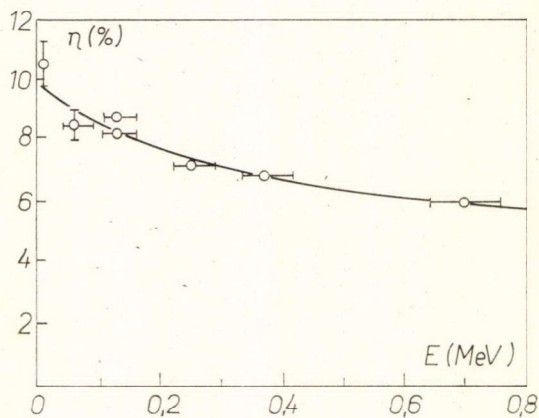
A parafin kisebb diffúziós hossza lehetővé teszi a grafit moderátoros 4π számlálók méreténél jelentősen kisebb 4π számlálók készítését. Ezeknél a parafin kockába vagy hengerbe fűrt párhuzamos lyukakba helyezik a számlálócsöveket. A neutronforrás a rendszer szimmetriatengelyébe kerül, a detektorok egy vagy több hengerpaláston helyezkednek el, egyenletes osztással a forrás, mint tengely körül. Az összeállítást gyakran bór vagy kadmium réteg és parafin borítás védi a környezetből szórt neutronoktól.

Az egyik első ilyen 4π számlálót *Johnson és munkatársai* készítették [41], [19]. 43 cm élhosszúságú kockában 8 cm sugarú körön 7 db BF_3 számlálócső helyezkedik el. A kockát Cd és paraffin árnyékolás veszi körül. A rendszer hatásfoka eléggé függ a neutronok szögeloszlásától, az izotrópesetre mért hatásfokot a 16. ábra mutatja. Ez az összeállítás sem a szögeloszlás-függetlenséget, sem az energia függetlenséget nem elégítette ki kellőképpen.

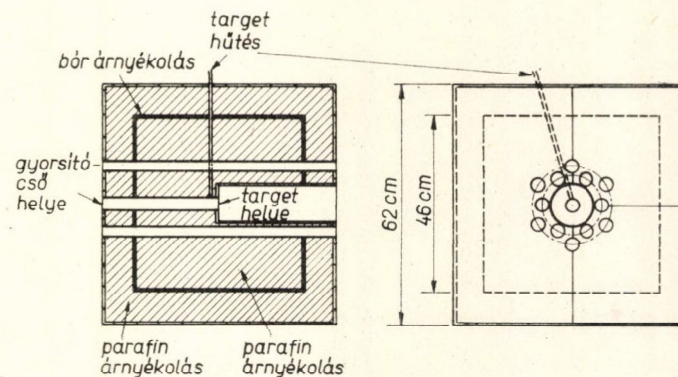
Marion és munkatársai 4π számlálójánál a detektorok két hengerpaláston történő elosztásával (6—6 detektor 7,5 cm ill. 10 cm sugarú körön 17. ábra) az érzékenység energia és szögeloszlás függését egyaránt sikerült megjavítani, valamint az érzékenység abszolút értékét megnövelni [42]. Mint a 18. ábrából is kitűnik a



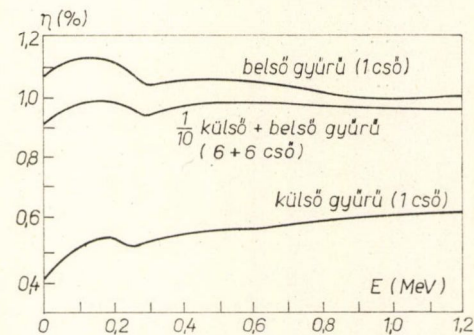
15. ábra. A 14. ábrán szereplő detektor érzékenysége a neutronenergia függvényében



16. ábra. Johnson 4π neutrondetektorának energiafüggése



17. ábra. Marion 4π neutrondetektora



18. ábra. Marion parafin moderátoros 4π neutrondetektorának energiafüggése

belső körben elhelyezett detektorok inkább a kisebb neutronenergiákra, a külső körben levők pedig a nagyobb energiákra érzékenyebbek. A kettő érzékenysége úgy egyenlíti ki egymást, hogy 0,1 és 1,2 MeV között az érzékenység 3%-on belül állandó.

Teranishi és munkatársai 10, 20, 30, 40, és 50 cm átmérőjű körben elhelyezett detektorokkal kimérték a termalizálódott neutronok hely-eloszlását, a detektorok által okozott fluxus-depressziót és részletesen megvizsgálták az anizotróp szög-eloszlás hatását [43]. Méréseik azt mutatták, hogy *Marion* összeállításánál lényegesen jobbat konstruálni parafintömb-egymással párhuzamos számlálók elrendezésével nem lehet.

5. Gyakorlati adatok

Az egyenletes érzékenységu fluxusmérőkben használt BF_3 töltésű proporcionális számlálóknak a számlálási karakterisztikája általában igen kedvező, a tápfeszültség forrással és az erősítővel szemben nem kell szigorú követelményeket támasztani. Pl. [15] szerint kétszeres diszkriminációs-feszültség változás csak 5% számlálási sebesség változást okozott.

Az ilyen számlálócsövekből készült összeállítások érzékenysége nagy, lásd a 4. táblázatot. (Az érzékenységi adatok az egyenletes tartományra vonatkoznak.)

4. TÁBLÁZAT

Különböző típusú fluxusmérők néhány összehasonlító adata.

Detektor típus	Érzékenység		Hivatkozás	Megjegyzés
	imp/n. cm^{-2}	%		
Hanson —McKibben- féle fluxusmérő	0,77	0,245	Nobles, Day et al. Hanson és McKibben Makra Zs. Borresen et al. „	a szokásos 200 mm átmérő helyett csak 150 mm átmérő
	0,80	0,255		
	$0,70 \pm 0,1$	$0,22 \pm 0,03$		
	0,76	$0,24 \pm 0,05$		
	0,63	$0,36 \pm 0,08$		
parafin gömb	$2,4 \pm 0,2$	$0,38 \pm 0,03$	Ladu, Pelliccioni, Rotondi	
4π detektorok				6 detektorral, 50 keV neutron energián mérve
1)	—	2,24	Teranishi et al.	
2)	—	$\sim 9,8$	Marion et al.	12 detektorral

IRODALOM

1. J. E. Brolley, J. L. Fowler: I. C. fejezet J. B. Marion és J. L. Fowler: Fast Neutron Physics I. könyvében.
2. J. H. Gibbons, H. W. Newson: I. E. fejezet az [1] alatt id. műben.
3. P. R. Byerly: IV. C. fejezet az [1] alatt id. műben.
4. Koltay E.: Neutronforrás abszolút intenzitásának mérése. *Magy. Fiz. Folyóirat*, 9, 89, 1961.
5. Barschall, Rosen, Taschek, Williams: Measurement of Fast Neutron Flux. *Rev. Mod. Phys.* 24, 1, 1952.
6. W. D. Allen: Neutron Detection. London, 1960.
7. B. B. Rossi, H. H. Staub: Ionization Chambers and Counters. McGraw-Hill Co. 1949.
8. Makra Zs.: Testekvivalens ionizációs kamrapár gyors neutron dózisintenzitás mérésre. *Sugárvéd. Koll. Bp.* 1963. *Atomtechn. Tájs.* 6, 743, 1963.
9. Makra Zs.: Neutron-dozimetria. *Magy. Fiz. Folyóirat* 13, 1, 1965.
10. G. S. Hurst: An Absolute Tissue Dosemeter for Fast Neutrons. *The Br. Journ. Radiol.* 27, 353, 1954.
11. E. B. Wagner, G. S. Hurst: Advances in the Standard Proportional Counter Method of Fast Neutron Dosimetry. *Rev. Sci. Instr.* 29, 153, 1958.
12. Makra Zs.: Neutron-dozimetria. *Sugárvédelmi Iskola I. (KFKI 1965)* 142—166.
13. K. Becker: *Filmdosimetrie*. Springer-Verlag, 1962.
14. E. Piesch: Zur Dosimetrie schneller Neutronen mit Kernspurfilm. *Atomprax.* 9, 179, 1963.
15. A. O. Hanson, J. L. McKibben: A Neutron Detector Having Uniform Sensitivity from 10 keV to 3 MeV. *Phys. Rev.* 72, 673, 1947.
16. Makra Zs.: publikálatlan adat.
17. Makra Zs.: Neutron dózisintenzitás meghatározás fluxus és átlagenergia mérés. *KFKI Közlemények*, 1966 (14) 49—61.
18. J. E. Draper: Evaluation of Neutron Counter Efficiency. *Nucl.* 6, No. 3. 1956.
19. W. D. Allen: Flat Response Counters, az [1] könyvben.
20. S. Borresen, B. Grimeland, S. Messelt: Directional Resolution and Shielding Properties of a Long Counter. *Nucl. Instr. and Meth.* 16, 135. 1962.
21. H. W. Schmitt, C. W. Cook: Absolute Neutron Absorption Cross Sections for Sb-Be Photoneutrons. *Nucl. Phys.* 20, 202, 1960.
22. П. И. Вацет, С. Г. Тоналетян, Г. А. Дорофеев: Детектор нейтронов с постоянной чувствительностью к нейтронам с энергиями от 0,025 до 14 Мэв. *Ат. Эн.* 7, 172, 1959.
23. M. H. McTaggart: A Study of the Neutron Long Counter. *AWRE NR/A—1/59*.
24. Vályi L.: Egyenletes érzékenységű neutron számláló. *Államvizsga dolg.* 1956.
25. Vályi L.: Egyenletes érzékenységű neutron számláló. *KFKI Közl.* 4, 319, 1956.
26. Vályi L.: Egyenletes érzékenységű neutronszámláló. *Magy. Fiz. Folyóirat* 5, 405, 1957.
27. E. Tochilin, R. V. Alves: Neutron Flux Measurements from 100 keV to 4 MeV with a Modified Long Counter. *Nucl. Instr. and Meth.* 8, 225, 1960.
28. Nobles, Day, Henkel, Jarvis, Kutarina, McKibben, Perry, Smith: Response of the Long Counter. *Rev. Sci. Instr.* 25, 334, 1954.
29. B. Antolkovič, B. Holmqvist, T. Wiedling: A Direction Sensitive Fast Neutron Monitor. *AE—144*.
30. T. V. Blosser, R. M. Freestone: A Study of the Shield of the Virginia Polytechnic Instr. UTR—10 Reactor. *ORNL—TM—290*.
31. T. V. Blosser, R. M. Freestone: The ORNL Mobile Radiation Measurement Laboratory. *Nucl.* 21, No. 2. 56. 1963.
32. Blosser, Freestone, Miller: A Study of the Shield of the Univ. of Illinois TRIGA MARK II. Research Reactor. *ORNL—TM—178*.
33. Фрид, Мирошников, Сложеникин, Барчуглов: Дозиметр нейтронов на основе "длинного" счетника. *Ат. Эо.* 16, 365., 1964.
34. Physical Aspects of Irradiation. *NBS Handbook* 85, 1964.
35. M. Ladu, M. Pelliccioni, E. Rotondi: On the Response to Fast Neutrons of a BF₃ Counter in a Paraffin Spherical—Hollow Moderator. *Nucl. Instr. and Meth.* 23, 173, 1963.
36. M. Ladu, M. Pelliccioni, E. Rotondi: Mesures de flux de neutrons rapides a l'aide d'un compteur non directionnel. *Symp. on Personnel Dosimetry Tech. for External Rad.*, Madrid, 1963.
37. Ladu, Pelliccioni, Rotondi, Siwicki: Misura di neutroni veloci con un contatore proporzionale al BF₃ in moderatore sferico cavo di paraffina. *Energia Nucleare* 11, 182, 1964.

38. *Ladu, Pelliccioni, Rotondi*: Flat Response to Neutrons between 20 keV and 14 MeV of a BF_3 Counter in a Spherical Hollow Moderator. Nucl. Instr. and Meth. 32, 173, 1965.
39. *G. A. Dorofeev, Y. P. Dobrinin*, J. Nucl. Energy, 5, 1957, 217 és [19]-ben.
40. *R. L. Macklin*: Graphite Sphere Neutron Detector. Nucl. Instr. and Meth. 1, 335, 1957.
41. *C. H. Johnson, A. Galonsky, J. P. Ulrich*: Proton Strength Functions from (pin) Cross Section. Phys. Rev. 109. 1243, 1958.
42. *Marion, Levesque, Ludemann, Detenbeck*: A Versatile, High Efficiency 4π Neutron Detector. Nucl. Instr. and Meth. 8, 297, 1960.
43. *Teranishi, Furubayashi, Michikawa, Kageyama, Yura*: A Paraffin-Moderated 4π Neutron Detector. Japan. J. of Appl. Phys. 3, 36, 1964.

KÖNYVISMERTETÉS

D. H. Martin: MAGNETISM IN SOLIDS

London, Iliffe Books Ltd., 1967

Az utóbbi évtizedben jelentősen megnőtt az érdeklődés a szilárdtestek mágneses tulajdonságai iránt. Mi sem bizonyítja ezt jobban, mint az, hogy egymás után jelennek meg összefoglaló monográfiák a mágnességről. Az új monográfiák megírását nyilvánvalóan az a körülmény indokolja, hogy mind az elméleti, mind a kísérleti vizsgálatok számos értékes, új eredményre vezettek.

Martin könyve érdekes és értékes vállalkozásról ad számot. Már a tartalomjegyzék megtekintése meggyőz bennünket arról, hogy a szerző újszerű elgondolásban dolgozta fel a mágnességre vonatkozó legfontosabb ismereteket.

Az első fejezetet a mágnesesen rendezett szilárdtestek ismertetésének szenteli és ezzel mindjárt a kezdet-kezdetén sikeresen mutatja be azt a változatosságot, amely a mágnesesen rendezett anyagokat jellemzi. A második fejezetben az atomok és ionok mágnességének eredetéről olvashatunk tömör összeállítást. A harmadik fejezet a diamágnességről és paramágnességről szól. A rendezett mágneses szerkezetek kialakulásának legegyszerűbb elméletét, a molekuláris tér koncepcióján alapuló elméletet, a negyedik fejezetben ismerteti, kiterjesztve mondanivalóját a nem kolineáris, spirális, modulált szerkezetű rendszerekre is. Az ötödik fejezetben a két elektron közötti kicserélődési kölcsönhatás leglényegesebb tulajdonságairól olvashatunk, míg a hatodik fejezetben megismerkedhetünk a kicserélődési kölcsönhatás következményeivel sok elektront tartalmazó rendszerekben. Végül az utolsó fejezetet a szerző arra használja fel, hogy a mágnesesen rendezett szerkezetek gerjesztett állapotainak elméletét vázolja egyszerű módszerekkel.

A könyvnek ez az eredeti felépítése lehetővé teszi, hogy a szerző a mágnességről a legújabb kísérleti és elméleti tények figyelembevételével írjon. Ez a törekvés a legsikeresebben az első fejezet megírásánál érvényesült, amely tömör összefoglalását adja a manapság ismert mágneses szerkezetek tipikus példáinak.

A szerző támaszkodik ugyan a kísérleti tényekre, ennek ellenére az olvasónak az a benyomása, hogy a kísérleti adatok inkább csak illusztrálásként szolgálnak és nem képezik a jelenségek tárgyalásának kiindulási alapját. A könyv tehát elsősorban elméleti ismeretek gyűjteménye. Sajnos, a könyvben közölt elméleti ismeretek egy része kvantummechanikai tankönyvbe való (pl. a második fejezetnek az egyelektron pályamozgását tárgyaló része, vagy az egyelektron spin-állapotról szóló rész, stb.). Ugyanakkor a mágnességgel kapcsolatos speciális elméleti részek gyengébben kidolgozottak. Feltehető, hogy a szerző nem kívánt a diamágnességről és a paramágnességről részletesen írni, azonban a könyvben szereplő ismertetés alig haladja meg egy általános szilárdtestfizikai tankönyv ismeretanyagát.

A mágneses szerkezetek molekuláris-tér-elméleti tárgyalását a szerző mintegy 55 oldalon keresztül részletezi, sajnos azonban anélkül, hogy ezen közelítés alkalmazhatóságának fizikai feltételeit

bemutatná. Közismert ugyanis az a tény, hogy a molekuláris tér bevezetése csak akkor tekinthető indokoltnak, ha a domináló kölcsönhatás hosszú hatótávolságú, mert csak ebben az esetben helyettesíthető — ekkor is csak bizonyos hibával — a kölcsönhatási potenciál valamilyen átlagos, effektív potenciállal.

A szerző bemutatja a spin-pálya kölcsönhatás szerepét a mágnesség elméletében, azonban feletébb sajnálatos, hogy egy olyan fontos jelenséget, mint a gyenge ferromágnességet, amely az utóbbi 10 év egyik legérdekesebb felfedezése volt, említés nélkül hagy.

Természetesen el kell fogadnunk a szerzőnek azt a törekvését, hogy a mágnesség elméletének ma már valóban nagyon szerteágazó irányzataiból sokat elhagy, de mégis hiányérzetünk van, amikor a könyv lapozgatása közben nem találkozunk a termodinamikai Green-függvények módszerével és ennek a módszernek a segítségével elért legfontosabb eredményekkel.

A szerző teljesen elkerülte a mágneses fázisátalakulási hőmérséklet környékén jelentkező anomális tulajdonságok ismertetését, jóllehet, hogy pl. a Curie-pont környéki aszimptotikus törvények és az ezekre a törvényekre vonatkozó ún. skála törvények ma nagyon sok mágnességgel foglalkozó elméleti és kísérleti fizikust izgatnak.

Azok, akik jól ismerik a mágnességgel foglalkozó irodalmat meglepetve veszik észre, milyen egyoldalúan használja fel Martin könyve a mindenütt elérhető nemzetközi irodalmat. Nincs egyetlen hivatkozás Dzsalosinszkij, Tyáblikov, Aprikoszov oly sokat idézett alapvető cikkeire és az is különösnek tűnik, hogy a mágnességről monográfiát lehet írni anélkül, hogy abban Landau neve elő ne forduljon. Természetesen ma már általános szokás, hogy a szerzők nem törekszenek teljes irodalomjegyzék összeállítására; azt azonban mindenképpen kívánatos hangsúlyozni, hogy a klasszikus-sá vált alapvető cikkek ismertetése nem hiányozhat a fiatalabb kutató nemzedék számára készülő monográfiákból.

Martin könyvének érdeme a konvencionálistól eltérő tárgyalási mód, az összefoglaló fejezetek újszerűsége és ezek az érdemek, véleményem szerint, elégségesek ahhoz, hogy a könyv megjelenését üdvözölhessük, még abban az esetben is, ha több kérdésben nem érthetünk egyet a szerző könyvszerkesztési elveivel. *(Pál Lénárd)*

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

A KVANTUMMECHANIKA VALÓSZÍNŰSÉGELMÉLETI FELÉPÍTÉSE*

NEUMANN JÁNOS

Berezetés

I. A kvantummechanika újabb fejlődése — mint ismeretes — eredményeinek két elvileg különböző felfogásához vezetett el, melyeket a „hullámelmélet”, és a „transzformációelmélet” vagy „statisztikus elmélet” elnevezéssel szokás megjelölni. Az utóbbi az, amellyel itt főképpen foglalkozni kívánunk.

A statisztikus elmélet úttörői *Born*, *Pauli* és *London* voltak; az elmélet lezárása *Dirac* és *Jordan* érdeme [1]. Az elmélet főként a következő típusú kérdések megválaszolását teszi lehetővé:

Adva van bizonyos fizikai mennyiség valamely meghatározott fizikai rendszerben. Milyen értékeket vehet fel? Melyek az ezen értékekhez tartozó *a priori* valószínűségek? Miként változnak meg ezek a valószínűségek, ha megadjuk bizonyos más (korábban mért) mennyiségek értékeit?

Önmagában ez a kérdésfeltevés nem idegen a klasszikus mechanikától sem, ott azonban a statisztikát mindenkor „élessé” tehetjük, azaz elérhetjük, hogy minden egyes fizikai mennyiség egy bizonyos számértéket az 1 valószínűséggel, az összes többit pedig a 0 valószínűséggel vegye fel. Ehhez csupán elég sok mennyiséget kell megmérnünk; ha a rendszer f szabadsági fokú, úgy a megméréndő független mennyiségek száma $2f$ (pl. f számú koordináta és a megfelelő konjugált impulzusok).

Az, hogy a kvantummechanikában ez *nem* így van, egyike a kvantummechanika karakterisztikus ismertetőjegyeinek: bizonyos mennyiségeket lehetetlen egyidejűleg megmérni [2]; így pl. valamely mennyiség és a hozzá konjugált impulzus mérése *sohasem* fér össze egymással.

A statisztikus kvantummechanikában eddig szokásos módszer lényegében deduktív jellegű volt: a hullámfüggvény bizonyos kifejtési együtthatóinak [3], vagy magának a hullámfüggvénynek az abszolútérték- négyzetét meglehetősen dogmatikusan a valószínűséggel tették egyenlővé, s az egyezést a tapasztalattal azután verifikálták. A kvantummechanika szisztematikus lezármasztatását a tapasztalati tényekből vagy valószínűségelméleti alapfeltevésekből, azaz: induktív megalapozását azonban mindeddig nem adták meg. Nem eléggé tisztázott a kvantummechanikának a közönséges valószínűségszámításhoz való viszonya sem: a valószínűség-számítás alaptörvényeinek (a valószínűségek összeadási és szorzási törvényének) érvényességét nem tárgyalták elegendő részletességgel [4].

Ebben a dolgozatban az elmélet ilyen induktív felépítését kívánjuk megkísérlni. Feltesszük eközben, hogy a közönséges valószínűségszámítás korlátozás

* Göttinger Nachr. Math.-Phys. Klasse, 1927, 245. old.

nélkül érvényes. Kitűnik, hogy az nem csupán összefér a kvantummechanikával, hanem (néhány kevésbé messzeható ténybeli és formális feltevessel együtt — vö. a IX. §-ban közölt összefoglalással, 1—3) egyértelmű lezármaztatásához is elegendő alapot nyújt. Ténylegesen sikerülni fog ezen az alapon az egész „időtől független” kvantummechanikát felállítanunk.

Célszerűnek fog bizonyulni, hogy bizonyos matematikai fogalomalkotásokat ismertnek feltételezzünk, melyek pl. a szerzőnek „A kvantummechanika matematikai megalapozása” c. dolgozata I—XI. §§-ban összeállítva megtalálhatók [5]. Éppen ezért a következőkben e dolgozat tartalmát fel fogjuk használni, annál is inkább, minthogy abban (XIII. §) a statisztikus kijelentéseknek a szokásostól eltérő (és annál általánosabb) megfogalmazása található, melyre ugyancsak szükségünk lesz. Ezt a dolgozatot a „K. M. M.” megjelöléssel fogjuk idézni.

Alapfeltevések

II. Legyen adott valamely fizikai rendszer, melyet \mathcal{S} -szel jelölünk és amelyhez a következőkben *mindvégig* ragaszkodunk. (A következők során sok rendszer fog szerepelni, melyeket az \mathcal{S}' , \mathcal{S}_1 , \mathcal{S}_2 , ..., \mathcal{S}'_1 , \mathcal{S}'_2 , ... szimbólumokkal jelölünk majd. Mindezek fizikai szerkezete \mathcal{S} -ével megegyezik, vö. [6], csak állapotaik tetszőlegesek.) Minthogy az adott rendszert statisztikus módszerekkel kívánjuk vizsgálni, gondoljuk el, hogy azt a külvilágtól tökéletesen elszigeteltük (ez az izoláció csupán mérések, azaz külső beavatkozások alkalmával szűnik meg időnként), feltesszük továbbá, hogy igen sok (mondjuk végtelen sok) példányban rendelkezésre áll: \mathcal{S}_1 , \mathcal{S}_2 , Az \mathcal{S} rendszerben definiált fizikai mennyiségeket így jelöljük: a , b , ...; az a mennyiség statisztikáját az $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ sokaságban elkészíteni annyit jelent, hogy az $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots$ rendszerek mindegyikét az „ a mérése” kísérletnek vetjük alá, s az értékek így adódó eloszlását feljegyezzük. (Vegyük figyelembe, hogy a valószínűségelmélet alapelvei szerint ugyanazt a statisztikát nyerjük, ha $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ helyett annak csupán egy (önkényesen kiragadott) részrendszerét vonjuk vizsgálat alá; ennek a részrendszernek magának is igen sok elemből kell állnia, de $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ -hoz viszonyítva tetszőlegesen kicsiny lehet. Ez a „statisztikus kiemelés” így tetszőlegesen kevésbé változtatja meg az $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ sokaságot.) Speciálisan azt mondjuk, hogy ez a statisztika „éles”, ha az $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots$ objektumok mindegyikén ugyanazt az értéket mértük, vagyis az egész értékeloszlás egyetlen számból áll.

Valamely statisztikus vizsgálatnak minden esetre az az alapja, hogy rendelkezésünkre áll egy $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ sokaság, melyben „elemi rendezetlenség” uralkodik, amelyben „az \mathcal{S} rendszer minden elgondolható állapota egyenlő gyakorisággal fordul elő”; ezen sokaság értékeloszlásait azután azon rendszerekhez kell hozzárendelnünk, amelyek állapotáról semmit sem tudunk [6]. Még azoknak az \mathcal{S}' rendszereknek a statisztikus viselkedése is, amelyekről valamit tudunk, lényegesen függ $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ -tól: ha pl. \mathcal{S}' -ről egyedül annyi bizonyos, hogy az a mennyiség értéke az I közben fekszik, úgy vegyük az $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ sokaságot, végezzünk el annak minden egyes $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots$ elemén egy kísérletet, mely eldönti, vajon a a értéke I -be esik-e vagy sem; $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots$ közül azok, amelyekre az első eredmény adódik, képezik azt az $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ sokaságot, amelynek statisztikáját a mi \mathcal{S}' rendszerünkre vonatkozóan feltételeznünk kell. Valamely \mathcal{S}' rendszer, amelyről bizonyos ismereteink vannak, ily módon mindig egy meghatározott $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ sokaságot képvisel, mely $\{\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots\}$ -ból jól meghatározott módon állt elő.

Az \mathcal{S}' rendszerre vonatkozó mindenfajta „ismeret”, azaz minden $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ sokaság annak felel meg, hogy minden egyes a mennyiséghez hozzárendelünk egy-egy várható értéket (azaz: értékei $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ esetében fellépő eloszlásának középértékét). Megfordítva az \mathcal{S}' rendszerre vonatkozó „ismeretünknek”, azaz $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ statisztikai összetételének maradéktalan leírását adja, ha az

$$a \leftrightarrow E(a) = a \text{ várható értéke}$$

hozzárendelést *minden* a mennyiségre megadjuk [7]. Fogalmilag egyenértékű és formális szempontból kedvezőbb, ha ezeket a hozzárendeléseket vizsgáljuk. Mielőtt azonban ezeket közelebbről megvizsgálánk, valamivel részletesebben foglalkoznunk kell az \mathcal{S} rendszerben definiált a, b, \dots mennyiségekkel.

A kvantummechanikában, ha egyidejűleg két mennyiséget (a és b) veszünk szemügyre, alapvetően fontos különbséget tennünk: vajon egyidejűleg megfigyelhetők-e vagy sem. Igenlő válasz esetén kell lennie egy a mérésre és egy b mérésre szolgáló kísérletnek, melyek egymást kölcsönösen nem zavarják (vö. az I. § kezdetén tett megjegyzésekkel); vagy ha a két kísérletet összefoglalva egynek tekintjük: kell, hogy létezzék egy olyan kísérlet, mely mind a -t, mind b -t méri. Az ilyen kísérlet esetében gondolhatjuk azt is, hogy voltaképpen egy harmadik d mennyiség mérése történt meg, melynek ismerete a -ét és b -ét magában foglalja, azaz amelynek mind a , mind b függvénye [8].

Valamely a mennyiség $f(a)$ függvénye (ahol $f(x)$ egy minden valós számra — és csak ezekre — értelmezett függvény) mindenesetre értelmes fogalom: az $f(a)$ mennyiséget ugyanúgy mérjük, mint a -t, csak éppen az utóbbinak, ha a megfigyelt értéke w , az $f(w)$ értéket kell tulajdonítanunk. Másként áll a dolog két (vagy több) mennyiség esetében, minthogy ezek esetleg nem figyelhetők meg egyidejűleg. Mindazonáltal, az összeget még sikerül ebben az esetben definiálni, mégpedig a következő okból.

Ahhoz, hogy valamely összeg várható értékét ismerjük, csak össze kell adnunk a két összeadandó várható értékét, tekintet nélkül arra, hogy milyen azok értékeloszlásának részletes szerkezete (milyenek a függőségi viszonyok). Minthogy a kvantummechanikai rendszerek fent adott leírásában csupán az egyes mennyiségek várható értékei játszottak szerepet, felfoghatjuk $a+b$ -t is mint mennyiséget, még ha a és b nem is figyelhetők meg egyidejűleg. Hasonlóképpen tetszőlegesen (vagy akár végtelen) sok a, b, c, \dots mennyiség összegét is definiálhatjuk; az összeg várható értékét (összhangban a valószínűségszámítás alapelveivel) mint a várható értékek összegét definiáljuk. További triviális általánosítás, hogy az összeadandókat bármiféle valós állandókkal meg szabad szorozni.

Két (esetleg egyidejűleg meg nem figyelhető!) mennyiség más függvényei, mint az összeg, semmilyen értelmes jelentéssel nem rendelkeznek: a, b valamely más függvényének várható értéke ugyanis egyáltalán nem fejezhető ki a és b várható értékeivel.

Immár abban a helyzetben vagyunk, hogy meg tudjuk fogalmazni, mi mindent kívánunk meg az $E(a)$ várható érték-hozzárendeléstől (mely az \mathcal{S}' rendszerre vonatkozó „ismeretek”, azaz egy $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ sokaság meghatározója).

A. Ha a, b, c, \dots véges vagy végtelen sok mennyiséget jelöl és $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ valós számok (s a szereplő összeg konvergál), úgy [9]

$$E(\alpha a + \beta b + \gamma c + \dots) = \alpha E(a) + \beta E(b) + \gamma E(c) + \dots$$

B. Ha α olyan mennyiség, amely a dolog természete szerint sohasem vesz fel negatív értékeket, úgy

$$E(\alpha) \geq 0.$$

A. motiválásával az előző diszkusszió során foglalkoztunk, de **B.** is magától értetődő tulajdonsága minden várható értéknek. Kommentárt inkább az igényel, amiről nem esett szó, nevezetesen a normálási feltétel: ha az α mennyiség értéke mindig 1, úgy $E(\alpha)$ is 1-gyel egyenlő: $E(\alpha) = 1$. Hiszen enélkül csupán relatív várható értékekkel, arányossági tényező erejéig meghatározott várható értékekkel van dolgunk. Ezen általánosítás okait legjobban a következő példa segítségével világíthatjuk meg.

Legyen α valamely mennyiség, I egy számköz, $f(x)$ pedig az a függvény, amely I -ben 1, másutt pedig 0. Ekkor $f(\alpha)$ várható értéke nyilvánvalóan annak valószínűsége, hogy α értéke az I közbe essék. Ha mármost pl. α minden valós értéket felvehet és mindegyiket ua. valószínűséggel, úgy ha a teljes $(-\infty, +\infty)$ intervallumhoz tartozó) valószínűséget 1-re normáljuk, annak valószínűsége, hogy α értéke I -ben fekszik (azaz: $f(\alpha)$ várható értéke), minden véges I közre 0. Ennek folytán két véges intervallum, I' és I'' relatív valószínűségéről egyáltalán semmit nem fogunk megtudni. Az erre vonatkozó információ azonban adott esetben sokkal fontosabb számunkra, mint az, hogy a teljes valószínűség 1 legyen; célszerű ezért az utóbbi feltételtől eltekinteni (és megengedni, hogy a teljes valószínűség $+\infty$ legyen), és beérni a relatív várható értékekkel és valószínűségekkel, melyek azután az érdekes (és nem lehetetlen!) esetekben nem tűnnek el [10].

A fenti elvi-fogalmi fejtegetésekhez még egy formális jellegű megjegyzést kell hozzáfűznünk: mindaddig nem lehet elméletéről beszélni, amíg az \mathfrak{S} rendszer α, b, c, \dots mennyiségeinek nem találtuk meg formális, azaz a számítás számára hozzáférhető ekvivalensét. A kvantummechanikából azonban nagyon jól tudjuk, milyen matematikai objektumokat kell a fizikai mennyiségekhez hozzárendelnünk: ezek az ún. lineáris szimmetrikus funkcionáloperátorok (melyeket a rendszer állapotterében értelmezett komplex értékű függvényekre — a hullámfüggvényekre — alkalmazunk, s amelyek e függvényeket ugyanilyen függvényekbe transzformálják). Egyelőre nem tárgyaljuk, hogy ez miért történik így; csupán később, megfontolásaink folyamán találjuk meg majd az egyes mennyiségekhez tartozó operátorok közvetlen értelmezését (vö. IV. § 7).

Az \mathfrak{S} állapotterében értelmezett komplex értékű függvények mármost a \mathfrak{H} absztrakt Hilbert-tér egy realizációját képezik [11]; az előbbiekre ható lineáris szimmetrikus funkcionáloperátorokat tehát \mathfrak{H} lineáris szimmetrikus operátoraival helyettesíthetjük [12]. Valamely operátor azonban a kvantummechanika számára csak akkor használható, ha „sajátértékproblémája” meg van oldva, vagy legalább is megoldható [13]; következésképpen minden fizikai mennyiséghez olyan lineáris szimmetrikus operátort kell hozzárendelnünk, amely „sajátértékalakban” előállítható [12]. Az ilyen operátorokat a rövidség kedvéért normális operátoroknak nevezzük; igen valószínű, hogy minden lineáris szimmetrikus operátor normális [14], ezzel a kérdéssel azonban itt nem kell foglalkoznunk. Mindezekre való tekintettel feltesszük tehát:

— Az \mathfrak{S} rendszerhez tartozó minden α fizikai mennyiségnek megfelel egy-egy (lineáris szimmetrikus) operátor; ez megfordítva is áll [15].

Annak, hogy ez a hozzárendelés részleteit tekintve milyen, nincsen számunkra jelentősége [16]; csupán két tulajdonságát használjuk fel, nevezetesen:

- C. S, T, \dots (ezek száma lehet véges vagy végtelen), valamint $\alpha S + BT + \dots$ legyenek normális operátorok. Ha az a, b, \dots mennyiségekhez az S, T, \dots operátorok vannak hozzárendelve, úgy az $\alpha S + BT + \dots$ operátort az $\alpha a + \beta b + \dots$ mennyiséghez rendeljük hozzá [17].
- D. S legyen normális operátor, $f(x)$ pedig egy (minden valós x -re értelmezett, valós értékű) függvény, és tartozzék S -hez az a mennyiség. Ekkor $f(S)$ -hez az $f(a)$ mennyiség tartozik [18].

Ez a két feltétel alkalmasint eléggé plauzibilis és az általános szokásnak megfelelő, úgyhogy azok behatódó diszkussziója szükségtelen.

A várható értékek általános alakja. Állapotok

III. A második paragrafus A.—D. pontjai alapján felállítható az összes lehetséges $a \leftrightarrow E(a)$ várhatóérték-hozzárendelés, vagyis: az \mathfrak{S}' rendszerre vagy az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaságra vonatkozóan lehetséges mindenfajta „ismeret”. A számítás céljára természetesen valamely normális operátornak a hozzátartozó mennyiség várható értékéhez való hozzárendelése bizonyul alkalmasnak; ha S az operátor, úgy ezt a (relatív) várható értéket jelölje $E(S)$. $E(S)$ -nek teljesítenie kell az A. és B. feltételeket, s eközben C. és D. is tekintetbe veendő.

Abból a célból, hogy a számításokat könnyebben végezhessük el, helyettesítsük \mathfrak{S} -t annak \mathfrak{S}_0 realizációjával, a közösleges Hilbert-térrel [19]; az előbbi tehát kölcsönösen egyértelmű módon leképezzük az utóbbira (ami természetesen sokféleképpen lehetséges). Valamely S lineáris operátor leírására ekkor egy $\{s_{\mu\nu}\}$ mátrix szolgál ($\mu, \nu = 1, 2, \dots$); általánosságban fennáll:

$$S(x_1, x_2, \dots) = y_1, y_2, \dots$$

$$y_\mu = \sum_{\nu=1}^{\infty} s_{\mu\nu} x_\nu;$$

a szimmetriát, mint az egyszerűen belátható, $s_{\mu\nu} = \bar{s}_{\nu\mu}$ fejezi ki. Vezessük be most a következő operátorokat: A_μ mátrixa legyen $s_{\mu\mu} = 1$, a többi $s_{\mu\sigma} = 0$; $B_{\mu\nu}$ ($\mu < \nu$) mátrixa legyen $s_{\mu\nu} = s_{\nu\mu} = 1$, a többi $s_{\mu\sigma} = 0$; $C_{\mu\nu}$ ($\mu < \nu$) mátrixa legyen $s_{\mu\nu} = i$, $s_{\nu\mu} = -i$, a többi $s_{\mu\sigma} = 0$. Ezek nyilván mind lineáris, szimmetrikus, és egyszersmind normális operátorok (az A operátoroknak az 1, a B és a C operátoroknak az 1 és a -1 egyszeres sajátértéke; ezeken kívül csak a végtelenszeres 0 sajátérték lép fel). Általánosságban fennáll (ha $z = u + iv$, úgy $\Re z$ és $\Im z$ az u -t, ill. a v -t jelöli):

$$S = \sum_{\mu} s_{\mu\mu} \cdot A_{\mu} + \sum_{\mu < \nu} \Re s_{\mu\nu} \cdot B_{\mu\nu} + \sum_{\mu < \nu} \Im s_{\mu\nu} \cdot C_{\mu\nu},$$

és így

$$E(S) = \sum_{\mu} s_{\mu\mu} \cdot E(A_{\mu}) + \sum_{\mu < \nu} \Re s_{\mu\nu} \cdot E(B_{\mu\nu}) + \sum_{\mu < \nu} \Im s_{\mu\nu} \cdot E(C_{\mu\nu}).$$

Ha most bevezetjük az

$$\left. \begin{aligned} u_{\mu\mu} &= E(A_\mu) \\ u_{\mu\nu} &= \frac{1}{2}E(B_{\mu\nu}) + i\frac{1}{2}E(C_{\mu\nu}) \\ u_{\nu\mu} &= \frac{1}{2}E(B_{\mu\nu}) - i\frac{1}{2}E(C_{\mu\nu}) \end{aligned} \right\} \mu < \nu$$

jelöléseket, úgy $u_{\mu\nu} = \bar{u}_{\nu\mu}$ és fennáll:

$$E(S) = \sum_{\mu\nu} s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu}.$$

Az $\{u_{\mu\nu}\}$ mátrixnak nyilvánvalóan megfelel egy lineáris szimmetrikus operátor, melyet U -nak nevezünk.

Tekintetbe kell vennünk továbbá **B.**-t. Ha φ a \mathfrak{H} (absztrakt) Hilbert-tér valamely pontja, amelyre $Q(\varphi) = 1$ (azaz: amely az egységgömb felületén helyezkedik el), úgy értelmezze a P_φ operátort („projekció a φ irányára”) a

$$P_\varphi f = Q(f, \varphi) \cdot \varphi$$

képlet; az nyilvánvalóan lineáris, szimmetrikus és normális (az 1 egyszeres, a 0 végtelenszeres sajátérték). P_φ egységoperátor, azaz $P_\varphi^2 = P_\varphi$. A \mathfrak{H}_0 realizációban φ felelően meg mondjuk az x_1, x_2, \dots pontnak ($\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2 = 1$); P_φ mátrixa ekkor nyilvánvalóan $\{\bar{x}_\mu x_\nu\}$.

Ha P_φ az α mennyiséghez tartozik, úgy $P_\varphi^2 = P_\varphi$ az α^2 mennyiségnek felel meg, azaz olyan mennyiségnek, mely természete szerint sohasem negatív. Így tehát $E(P_\varphi) \geq 0$, azaz

$$\sum_{\mu\nu} \bar{x}_\mu x_\nu \bar{u}_{\mu\nu} = \sum_{\mu\nu} u_{\nu\mu} x_\nu \bar{x}_\mu \geq 0;$$

a bal oldal azonban, mint arról könnyen meggyőződhetünk, $Q(\varphi, U\varphi)$ -vel egyenlő. Így tehát minden φ -re ($Q(\varphi) = 1$) fennáll: $Q(\varphi, U\varphi) \geq 0$, azaz

$$Q(f, Uf) \geq 0$$

a \mathfrak{H} tér minden f elemére. Az ilyen tulajdonságú U operátort (nemnegatív) definitnek mondjuk [20].

Most bebizonyítjuk a fentiek megfordítását: minden U definit lineáris szimmetrikus operátor (az $E(S)$ képletnek megfelelően) az **A.**, **B.** feltételeket kielégítő statisztika létrejöttét eredményezi. Az, hogy **A.** teljesül, az (a **C.** feltétel figyelembe vételével) nyilvánvaló; még **B.** fennállását kell igazolnunk.

Ha az α mennyiség természete szerint sohasem negatív, úgy képezhető a $\beta = \sqrt{\alpha}$ mennyiség, melyhez tartozzék a T operátor. Az $\alpha = \beta^2$ mennyiséghez ekkor az $S = T^2$ operátor tartozik, mely tehát definit [21]. Be kell bizonyítanunk: ha az S, U definit operátorok mátrixai $\{s_{\mu\nu}\}$, ill. $\{u_{\mu\nu}\}$, úgy

$$\sum_{\mu\nu} s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu} \geq 0.$$

Elegendő azonban, ha az $N=1, 2, \dots$ esetek mindegyikére igazoljuk, hogy

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu} \geq 0$$

(ezután elvégezzük az $N \rightarrow \infty$ határátmenetet); így tekintetbe vesszük, hogy a (véges-dimenziós!)

$$\sum_{\mu, \nu=1}^N s_{\mu\nu} x_{\mu} \bar{x}_{\nu}, \quad \sum_{\mu, \nu=1}^N u_{\mu\nu} x_{\mu} \bar{x}_{\nu}$$

Hermite-féle alakok nemnegatív-definiték (minthogy ugyanez a megfelelő végtelen-dimenziós alakokra igaz). Könnyen meggyőződhetünk arról, hogy $\sum_{\mu, \nu=1}^N s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu}$

(az N -dimenziós térben!) ortogonál-invariáns; ennek folytán $\sum_{\mu, \nu=1}^N s_{\mu\nu} x_{\mu} \bar{x}_{\nu}$ átlós

alakra hozható. Minden $s_{\mu\nu}$, melyre $\mu \neq \nu$, zérus, így tehát $\sum_{\mu, \nu=1}^N s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu}$ átlós elemek szorzatainak összege; nemnegatív definit Hermite-féle alakok átlós elemei sohasem negatívak, a mi összegünk tehát ≥ 0 . Ezzel mindent bizonyítottunk.

Ily módon a következő eredményt nyertük: valamely \mathfrak{S}' rendszerre vonatkozó minden lehetséges „ismeret”, vagyis az összes lehetséges $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ statisztikus sokaság kölcsönösen egyértelmű megfelelésben áll az U definit lineáris szimmetrikus operátorokkal. Ezt a hozzárendelést a várható érték

$$E(S) = \sum_{\mu\nu} s_{\mu\nu} \bar{u}_{\mu\nu}$$

képlete (S, U mátrixa $\{s_{\mu\nu}\}$, ill. $\{u_{\mu\nu}\}$) írja le.

Képletünkéből látható, hogy ha U -t megszorozzuk valamely tényezővel, ez $E(S)$ -et ugyanazon állandó tényezővel változtatja meg, vagyis (minthogy relatív várható értékekkel dolgozunk) ez nem tesz semmit; azonban U minden más változása lényeges. Nem lehet továbbá $E(S)=0$, azaz $U=0$, minthogy ekkor minden (relatív) várható érték és valószínűség eltűnnék, és egyáltalán nem volna semmiféle statisztika [22].

IV. A harmadik paragrafusban meghatároztuk az összes lehetséges $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ statisztikus sokaságot, és azokat hozzárendeltük a definit lineáris szimmetrikus U operátorokhoz. Ebben a §-ban a „tisztá”, „homogén” sokaságokat kívánjuk meghatározni, vagyis azokat, amelyekben az $\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots$ rendszerek mindegyike ugyanabban az állapotban van. Ezzel együtt megismerjük mindazon állapotokat, amelyekben az \mathfrak{S} rendszer helyét foglalhat. Ezzel kapcsolatban a következőket kell kiemelnünk: a klasszikus mechanikában (mely ugyanúgy mint a kvantummechanika, statisztikus alapon szemléltethető) valamely „homogén” $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaságban, másképpen: valamely tökéletesen ismert állapotú rendszerben, minden a mennyiség éles eloszlással rendelkezik. Azaz: minden a rendelkezik valamely értékkel, melyet abszolút bizonyossággal felvesz. A kvantummechanikában, mint ismeretes (és amint azt meg fogjuk mutatni), másként áll a helyzet: minden \mathfrak{S}' állapotban vannak olyan a mennyiségek, amelyek eloszlása nem éles, azaz: amelyek értéke még függ a véletlentől.

Miképpen jellemezhető valamely „homogén” $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság [23]? A következőképpen: nem állítható elő két másik sokaság keverésével, hacsak azok mindketten nem egyeznek meg az adott sokasággal. (Valamely nem-homogén sokaság mindenkor előállítható ily módon, két tőle különböző sokaságból — ezt felesleges itt részletesebben kifejteni.) Ezen tulajdonságnak formális megfogalmazást kell adnunk.

Ha $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ az $\{\mathfrak{S}^*_1, \mathfrak{S}^*_2, \dots\}$ és $\{\mathfrak{S}^{**}_1, \mathfrak{S}^{**}_2, \dots\}$ sokaságokból áll elő oly módon, hogy ezeket meghatározott arányban keverjük, úgy a megfelelő (relatív) várható értékre fennáll:

$$E(S) = \eta E^*(S) + \vartheta E^{**}(S) \quad (\eta > 0, \quad \vartheta > 0)$$

az ezekhez a III. § szerint tartozó (definit lineáris szimmetrikus) operátorokra pedig

$$U = \eta U^* + \vartheta U^{**}.$$

Eszerint U akkor és csak akkor jellemez homogén sokaságot, azaz \mathfrak{S} tökéletesen meghatározott állapotát, ha a fenti egyenletből következik, hogy U^* és U^{**} csupán állandó tényezőkben különböznek U -tól. Vagy ha η -t és ϑ -t beolvasztjuk U^* -ba, ill. U^{**} -ba:

$$U = U^* + U^{**}$$

fennállásából (itt U^* , U^{**} definit lineáris szimmetrikus operátorok) következnek U^* , U^{**} és U arányossága.

Most a következőt állítjuk: az egyedüli $U \neq 0$ definit lineáris szimmetrikus operátorok, melyek a fenti tulajdonsággal rendelkeznek (lényegtelen állandó pozitív tényezőktől eltekintve) a P_φ -k ($\varphi \in \mathfrak{H}$, $Q(\varphi) = 1$, vö. a III. §-ban megadott definícióval).

Először rendelkezék U az említett tulajdonságokkal. Válasszuk ki ezután \mathfrak{H} valamely f elemét, melyre $Uf \neq 0$; ekkor $Q(f, Uf) > 0$ [24] és így írható:

$$U^*g = \frac{Q(g, Uf)}{Q(f, Uf)} \cdot Uf, \quad U^{**}g = Ug - \frac{Q(g, Uf)}{Q(f, Uf)} \cdot Uf.$$

Nyilvánvaló, hogy $U = U^* + U^{**}$; továbbá

$$Q(g, U^*g) = \frac{Q(g, Uf)}{Q(f, Uf)} Q(Uf, g) = \frac{|Q(g, Uf)|^2}{Q(f, Uf)},$$

$$\begin{aligned} Q(g, U^{**}g) &= Q(g, Ug) - \frac{Q(g, Uf)}{Q(f, Uf)} Q(Uf, g) \\ &= \frac{Q(g, Ug)Q(f, Uf) - |Q(g, Uf)|^2}{Q(f, Uf)}. \end{aligned}$$

Az U^* operátor definit jellege közvetlenül következik az első egyenletből, U^{**} -é pedig a másodikból, figyelembe véve a [24] megjegyzésben található egyenlőtlenséget; nyilvánvaló továbbá, hogy U^* és U^{**} lineáris szimmetrikus operátorok. Így U^* -nak arányosnak kell lennie U -val, minthogy azonban

$$U^*f = Uf \neq 0,$$

teljesülnie kell az $U^* = U$ egyenlőségnek. Írjuk ennek alapján:

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{Q(Uf)}} \cdot Uf, \quad \alpha = \frac{Q(Uf)}{Q(f, Uf)};$$

ekkor

$$U = U^* = \alpha P_\varphi, \quad Q(\varphi) = 1.$$

Azaz: U a pozitív állandó α tényezőtől eltekintve a kívánt alakú.

Másodszor legyen $U = P_\varphi, Q(\varphi) = 1$. Legyen továbbá

$$U = U^* + U^{**},$$

ahol U^* és U^{**} definit operátorok. Valahányszor $Uf = 0$,

$$0 \leq Q(f, U^*f) \leq Q(f, U^*f) + Q(f, U^{**}f) = Q(f, Uf) = 0,$$

$$Q(f, U^*f) = 0$$

folytán a [24] megjegyzés szerint kell, hogy $U^*f = 0$ legyen. Eszerint $Q(f, \varphi) = 0$, $Uf = 0$ fennállásából $U^*f = 0$ következik; minden g -re teljesül tehát

$$Q(U^*f, g) = Q(f, U^*g) = 0.$$

Azaz: U^*g ortogonális minden olyan f -re, amely φ -re ortogonális, és így φ -vel arányosnak kell lennie. Speciálisan $U^*\varphi = \alpha\varphi$. Továbbá minden f -re igaz $f = Q(f, \varphi) \cdot \varphi + f'$, ahol f' ortogonális φ -re; fennáll tehát:

$$U^*f = Q(f, \varphi) \cdot U^*\varphi + U^*f' = Q(f, \varphi) \cdot \alpha\varphi = \alpha \cdot P_\varphi f = \alpha \cdot Uf,$$

azaz $U^* = \alpha \cdot U$. Így tehát U^* arányos U -val, és egyszersmind $U^{**} = U - U^*$ is, amivel mindent bebizonyítottunk.

A teljesen meghatározott állapotok vagy homogén sokaságok ily módon a \mathfrak{H} térben a $Q(\varphi) = 1$ egységömb felszínén fekvő φ pontoknak felelnek meg. A hozzárendelést az határozza meg, hogy a várható értékeket meghatározó U operátor P_φ -vel egyenlő; ebből kiindulva $E(S)$ azon nyomban meghatározható. Elég, ha áttérünk a \mathfrak{S}_0 realizációra, ahol S -nek mátrixa $\{s_{\mu\nu}\}$, φ pedig a \mathfrak{S}_0 tér x_1, x_2, \dots pontja; ekkor P_φ -nek $\{\bar{x}_\mu x_\nu\}$ a mátrixa, és kapjuk:

$$E(S) = \sum_{\mu\nu} s_{\mu\nu} x_\mu \bar{x}_\nu = Q(\varphi, S\varphi).$$

Vagyis: az a mennyiségnek, mely az S operátorhoz tartozik, abban az állapotban, amely a \mathfrak{H} tér φ pontjának felel meg, $Q(\varphi, S\varphi)$ a várható értéke.

Mindenek előtt szeretnénk megállapítani e kifejezés néhány tulajdonságát.

α . A \mathfrak{H} tér két eleme, φ és ψ , nyilvánvalóan akkor és csak akkor szolgáltatja ugyanazokat a várható értékeket (eltekintve egy pozitív állandó tényezőtől), azaz: akkor és csak akkor határozza meg ugyanazt az állapotot, ha közöttük csupán egy állandó faktor az eltérés (ennek $Q(\varphi) = Q(\psi) = 1$ folytán egységnyi abszolútértékűnek kell lennie).

β . Ha valamely mennyiség értéke mindig 1, úgy annak operátora is az 1 (az egységoperátor, vö. D.), és a fenti szkéma alapján számított várható érték

$$Q(\varphi, 1\varphi) = Q(\varphi, \varphi) = 1.$$

Azaz: helyes a normálás, várható értékeink és valószínűségeink nem relatívek, hanem abszolútok.

γ . Az $E(S) = Q(\varphi, S\varphi)$ képlet lehetővé teszi az adott a mennyiséghez tartozó S operátor közvetlen értelmezését: az (ill. az annak mátrixához tartozó Hermite-

féle alak) a rendszer összes elgondolható állapotában megadja α (abszolút) várható értékét. A kapcsolat tehát az elgondolható legegyszerűbb.

δ. Ahhoz, hogy az α mennyiséghez (melynek S az operátora) tartozó értékeloszlás éles legyen, szükséges és elégséges, hogy φ sajátfüggvénye legyen S -nek; ekkor a értéke a φ -hez tartozó sajátérték. Ezt így mutathatjuk meg:

Ahhoz, hogy α számára egyedül a w érték legyen lehetséges, a valószínűségnek, hogy α értéke az I intervallumban fekszdjék, 1-nek vagy 0-nak kell lennie aszerint, hogy w benne fekszik-e I -ben vagy sem. Ha az $f(x)$ függvény I -ben 1 és másutt 0, úgy a mondott valószínűség $f(\alpha)$ várható értéke. Minthogy $f(S)$ egyenlő $E(I)$ -vel ($E(\lambda)$ legyen az S -hez tartozó egységfelbontás; a terminológia ismét a K. M. M. dolgozatot követi, IX. §), így ez a várható érték

$$Q(\varphi, E(I)\varphi) = Q(\varphi, E(w'')\varphi) - Q(\varphi, E(w')\varphi) = Q(E(w'')\varphi) - Q(E(w')\varphi)$$

(itt I a w' -től w'' -ig terjedő intervallumot jelöli). Ez vagy 1, vagy 0 aszerint, hogy w benne fekszik-e I -ben vagy sem, azaz

$$Q(E(w')\varphi) = 0, \quad E(w')\varphi = 0,$$

ill.

$$Q(E(w')\varphi) = 1 = Q(\varphi), \quad E(w')\varphi = \varphi$$

aszerint, hogy a $w' < w$ vagy $\geq w$ egyenlőtlenség áll-e fenn. Ez azonban azt jelenti, hogy $S\varphi = w\varphi$, amivel mindent bizonyítottunk [25].

Minthogy bizonyosan léteznek olyan S operátorok, amelyeknek φ nem sajátfüggvénye, azért minden állapotban vannak olyan mennyiségek, amelyek értékeinek eloszlása nem éles.

Mérések és állapotok

V. A negyedik paragrafus végső eredménye lehetővé teszi számunkra, hogy valamely tökéletesen ismert állapotban található rendszer összes várható értékét és valószínűségét meghatározzuk. Ezzel azonban eltértünk voltaképpen feladatunktól: valamely \mathfrak{S}' rendszerre, valamely $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ statisztikus sokaság szerkezetére vonatkozó ismereteink leírása sohasem az állapot — vagy éppen a hozzátartozó φ — megadásával történik, hanem általában a rendszeren elvégzett kísérletek eredményei által. Meg kell kísérelnünk, hogy formális eszközeink segítségével ilyen leírást adjunk meg.

Először is megállapítjuk, mikor lehet egyszerre megfigyelni az m számú $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiséget (melyek operátorai S_1, S_2, \dots, S_m). Elvben ezt a kérdést már a II. §-ban megválasztuk: ha azok mérése együttvéve egyetlen mérésnek tekinthető, mely azután egyetlen a mennyiség értékét szolgáltatja. Ekkor azonban az $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiségeknek a függvényeinek, vagyis az S_1, S_2, \dots, S_m operátoroknak S függvényeinek kell lenniök (vö. [8]). Mikor található tehát az m számú S_1, S_2, \dots, S_m normális operátorhoz egy olyan S normális operátor és m számú olyan $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ függvény, hogy $S_\mu = f_\mu(S)$ legyen ($\mu = 1, 2, \dots, m$)?

Az S operátor két függvénye felcserélhető [26], így az S_1, S_2, \dots, S_m operátoroknak mind felcserélhetőeknek kell lenniök; ennél azonban még több igaz. Ha az S_1, S_2, \dots, S_m operátorokhoz rendre az $E_1(\lambda), E_2(\lambda), \dots, E_m(\lambda)$ egységfelbontások tartoznak, úgy $E_\mu(\lambda)$ függvénye S_μ -nek [27], tehát S -nek is; így tehát az összes

$E_\mu(\lambda)$ -nak ($\mu = 1, 2, \dots, m$; λ tetszőleges) egymással felcserélhetőnek kell lennie. Ha S_1, S_2, \dots, S_m között fennáll ez a viszony, úgy a K.M.M. nyomán (XIII. §) azt mondjuk, hogy azok teljesen felcserélhetők [28].

E tétel megfordítása is igaz: ha S_1, S_2, \dots, S_m teljesen felcserélhetők, vagyis az összes $E_\mu(\lambda)$ ($\mu = 1, 2, \dots, m$; λ tetszőleges) felcserélhető, úgy létezik egy olyan S normális operátor, melynek az S_1, S_2, \dots, S_m operátorok mindegyike függvénye. A bizonyítást azonban, mellyel kapcsolatban csak formális nehézségek merülnek fel, itt nem kívánjuk részletezni [29].

Megmutattuk tehát: az m számú $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiség akkor és csak akkor mérhető egyidejűleg, ha operátoraik teljesen felcserélhetők. (A teljes felcserélhetőség körülbelül — vö. [28] — ugyanaz mint a közös felcserélhetőség; az utóbbit Dirac jelölte meg mint a szimultán mérhetőség ismérvét; lásd [25] alatt idézett dolgozatát.) És ilyenkor mindig létezik olyan α mennyiség, melynek mérése magában foglalja az előbbieket.

Az eddigiek során megállapítottuk, mikor mérhető egyidejűleg több mennyiség tetszőleges pontossággal. Még azt kell megtárgyalnunk, mi a helyzet akkor, ha a mennyiségek közül némelyek iránt csak korlátozott mértékben érdeklődünk, pl. ha csak azt kívánjuk tudni, hogy azok bizonyos meghatározott intervallumokban fekszenek-e vagy sem. Legyen tehát feladatunk eldönteni, vajon az $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiségek benne fekszenek-e rendre az I_1, I_2, \dots, I_m intervallumokban, továbbá tetszőleges pontossággal megmérni a b_1, b_2, \dots, b_n mennyiségeket. Legyen $f_\mu(x)$ az a függvény, amely 1 vagy 0 aszerint, hogy x benne fekszik-e I_μ -ben vagy sem; ekkor az $f_\mu(\alpha_\mu)$ mennyiség 1 vagy 0 aszerint, hogy α értéke beleesik-e I_μ -be vagy sem. Eszerint az $f_\mu(\alpha_\mu)$ függvényeket és a b_ν mennyiségeket kell tetszőleges pontossággal mérnünk.

Az α_μ, b_ν mennyiségekhez tartozzanak az S_μ , ill. T_ν operátorok, ez utóbbiakhoz pedig az $E_\mu(\lambda)$, ill. $F_\nu(\lambda)$ egységfelbontások; $f_\mu(\alpha_\mu)$ operátora ekkor $f_\mu(S_\mu) = E_\mu(I_\mu)$. Az $E_\mu(I_\mu)$ operátorhoz (ez egységoperátor!) tartozó egységfelbontás nyilvánvalóan a következő: $\lambda < 0$ esetén $0, 0 \leq \lambda < 1$ esetén $1 - E_\mu(I_\mu), 1 \leq \lambda$ esetén 1 . Az $f_\mu(S_\mu)$ és T_ν operátorok teljes felcserélhetősége (amelyet meg kell kívánnunk) azt jelenti tehát, hogy az $E_\mu(I_\mu)$ operátoroknak egymás között és az összes $F_\nu(\lambda)$ -val, és ez utóbbiaknak egymás között felcserélhetőnek kell lenniök. Ezzel megkaptuk a keresett feltételt.

Megmutatjuk ezenkívül: ha α_1, α_2 két egyidejűleg megfigyelhető mennyiség, melyek operátorai S_1 és S_2 , úgy szorzatuknak (ennek az egyidejű megfigyelhetőség folytán nyilvánvalóan van értelme) operátora $S_1 S_2$. Az α_1, α_2 mennyiségeknek ugyanis valamely α mennyiség (ennek operátora S) függvényeinek kell lenniök; ekkor $\alpha_1 = f(\alpha), \alpha_2 = g(\alpha), \alpha_1 \alpha_2 = h(\alpha)$ ($h(x) = f(x)g(x)$), tehát $S_1 = f(S), S_2 = g(S)$, és az $\alpha_1 \alpha_2$ szorzathoz tartozó operátor $= h(S) = f(S)g(S) = S_1 S_2$ (vö. [26]). (A teljes felcserélhetőség folytán természetesen $S_1 S_2 = S_2 S_1$, azaz a szorzás kommutatív.) A tétel nyomban átvihető tetszőleges (véges) sok egyidejűleg megfigyelhető tényezőre [30].

VI. Tegyük fel most, hogy az m számú $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiségről egyidejűleg megállapítottuk, hogy azok értékei az I_1, I_2, \dots, I_m intervallumokban fekszenek (az, hogy vajon csak ezek a megállapítások tehetők meg egyidejűleg, vagy éppen az összes $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ egyidejű mérése lehetséges, nem fontos).

Ha az \mathcal{S}' rendszerről csak ezt tudjuk, azaz ha az $\{\mathcal{S}'_1, \mathcal{S}'_2, \dots\}$ sokaság a II. §-ban említett fundamentális sokaságból úgy állt elő, hogy annak minden egyes elemén

elvégeztük a fenti mérést, és azokat, amelyek pozitív eredményt adtak, összefoglaltuk a $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokasággá — mi akkor \mathfrak{S}' , ill. $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ statisztikája? Azaz: mely definit lineáris szimmetrikus U operátor jellemzi (a III. §-nak megfelelően ezt a statisztikát)?

Ezt a kérdést csak a következő §-ban válaszolhatjuk meg maradéktalanul; ebben a §-ban csak az előmunkálatokat végezzük el és egy részletkérdést válaszolunk meg (azt, hogy a fenti ismeret mikor elégséges az \mathfrak{S}' állapotának teljes meghatározásához és mi ez az állapot).

Az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság minden egyes elemén olyan mérés történt, amely az $f_\mu(\alpha_\mu)$ mennyiségre az 1 eredményt adta, azaz: a $g_\mu(\alpha_\mu)$ mennyiségre ($g(x)=0$ az I_μ közben, egyebütt $=1$, $f(x)+g(x)=1$, és így $g_\mu(S_\mu)=1-f_\mu(S_\mu)=1-E_\mu(I_\mu)$) a 0 értéket (mind $f_\mu(\alpha_\mu)$, mind $g_\mu(\alpha_\mu)$ eleve csak a 0 és 1 értékeket vehetik fel). A mérés ismételésekor így újra minden esetben 0-nak kell adódnia [31], azaz: $g_\mu(\alpha_\mu)$ eloszlása éles, a 0 értékkel. El kell tűnnie $g_\mu(\alpha_\mu)$ várható értékeknek is (a relatív várható értékének is!), és minthogy $g_\mu(\alpha_\mu)$ operátora $1-E_\mu(I_\mu)$, fenn kell állnia az

$$E(1-E_\mu(I_\mu))=0$$

összefüggésnek. Innen azonban némely következtetés vonható le U -ra vonatkozóan.

Feküdjön φ az $E_\mu(I_\mu)$ operátor külsejében, azaz $1-E_\mu(I_\mu)$ belsejében, és legyen $Q(\varphi)=1$. Ekkor a P_φ egységoperátorra fennáll: $P_\varphi \equiv 1-E_\mu(I_\mu)$ [32]. Eszerint P_φ és $1-E_\mu(I_\mu)-P_\varphi$ egységoperátorok, vagyis definit normális operátorok [33]. Tehát

$$0 \leq E(P_\varphi) \leq E(P_\varphi) + E(1-E_\mu(I_\mu)-P_\varphi) = E(1-E_\mu(I_\mu)) = 0,$$

$$E(P_\varphi) = 0.$$

A III. §-ban kiszámítottuk $E(P_\varphi)$ -t az $Q(\varphi, U\varphi)$ -vel egyenlő. $Q(\varphi, U\varphi)=0$ fennállásából a [24] megjegyzés szerint $U\varphi=0$ következik. Azaz: $E_\mu(I_\mu)$ külsejében $Q(\varphi)=1$ -ből $U\varphi=0$ következik, ott tehát mindenkor $U\varphi=0$. Eszerint \mathfrak{S} minden g elemére fennáll:

$$U(1-E_\mu(I_\mu))g=0, UE_\mu(I_\mu)g=Ug, UE_\mu(I_\mu)=U.$$

Minthogy az $E_1(I_1), E_2(I_2), \dots, E_m(I_m)$ operátoroknak felcserélhetőeknek kell lenniök,

$$E = E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m)$$

egységoperátor; a fenti egyenletet a $\mu=1, 2, \dots, m$ esetekre alkalmazva kapjuk: $UE=U$.

Következésképpen U, E, UE lineáris szimmetrikus operátorok, amiből következik U és E felcserélhetősége; fennáll tehát:

$$EU = UE = U.$$

Ilyen általánosságban maradvány egyelőre nem jutunk tovább.

Vegyük szemügyre azonban a következő két speciális esetet. Először legyen $E=0$. Ekkor $U=UE=0$, azaz minden várható érték eltűnik. Következésképpen ilyen mérési eredmények a valóságban sohasem fordulnak elő — később látni fogjuk, hogy azokhoz ténylegesen mindenkor a 0 valószínűség tartozik.

Másodszor legyen E belseje egydimenziós, azaz kizárólag valamely $\varphi \neq 0$ elem többszöröseiből álljon (φ -t a $Q(\varphi)=1$ feltétellel normáljuk, ahol is természete-

tesen egy egységnyi abszolútértékű állandó tényező még szabadon marad). Ekkor, amint azt könnyen beláthatjuk, $E = P_\varphi$. Innen U -ra következik:

$$U = EUE = P_\varphi UP_\varphi,$$

$$Uf = P_\varphi UP_\varphi f = Q(f, \varphi) \cdot Q(U\varphi, \varphi) \cdot \varphi = Q(U\varphi, \varphi) \cdot P_\varphi f,$$

$$U = Q(U\varphi, \varphi) \cdot P_\varphi.$$

Itt $Q(U\varphi, \varphi)$ állandó tényező, melynek — minthogy U, P_φ definit operátorok — pozitívnak kell lennie; így az elhagyható és kapjuk: $U = P_\varphi$. Azaz megkaptuk a φ -hez tartozó állapot statisztikáját! Mondhatjuk tehát: \mathfrak{S}' a φ állapotban van, az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság homogén.

Ezzel megjelöltük azokat a méréseket, amelyek \mathfrak{S}' állapotát maradéktalanul meghatározzák. Ha az S operátor spektruma csupa egyszeres sajátértékből álló pontspektrum, és a spektrumnak folytonos része nincs — az ilyen S -et abszolút diszkrétnek és nem elfajultnak mondjuk —, ha továbbá a pontspektrumot az I_1, I_2, \dots intervallumok egy sorozatával lefedjük oly módon, hogy azok mindegyike S -nek pontosan egy sajátértékét tartalmazza, úgy a rendszer állapotának maradéktalan rögzítésére a következő mérés nyilvánvalóan elégséges: Legyen α az S -hez tartozó mennyiség, és azt kell megállapítanunk, hogy α értéke az I_1, I_2, \dots intervallumok közül melyikben fekszik. (Ha ugyanis a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényekhez tartozó w_1, w_2, \dots sajátértékek rendre az I_1, I_2, \dots közőkben fekszenek, és az S -hez tartozó egységfelbontás $E(\lambda)$, úgy $E(I_n) = P_{\varphi_n}$ — vö. K.M.M., X. §.)

Vegyük tekintetbe, hogy ennek a mérésnek még csak nem is kell abszolút pontosságúnak lennie; ha a w_1, w_2, \dots sajátértékek egymástól elég távol fekszenek, úgy az I_1, I_2, \dots intervallumok ennek megfelelő hosszúságúnak választhatók [34].

Különböző mérések statisztikus kapcsolata

VII. Legyen $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ és I_1, I_2, \dots, I_m valamint S_1, S_2, \dots, S_m és $E_1(\lambda), E_2(\lambda), \dots, E_m(\lambda)$ jelentése ugyanaz mint a VI. §-ban; most azonban nem kívánjuk meg, hogy

$$E = E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m)$$

belseje egydimenziós legyen. A VI. § megfontolásait, vagyis azon U meghatározását, amely az „ $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ értékei rendre az I_1, I_2, \dots, I_m intervallumokban fekszenek” ismeret alapján előálló statisztikához tartozik, teljes általánosságban végig kívánjuk vinni.

Először egy megjegyzés. Legyen b_1, b_2, \dots, b_n további n számú mennyiség, J_1, J_2, \dots, J_n pedig n számú intervallum; legyen egyidejűleg megállapítható, vajon b_1 a J_1 -ben, b_2 a J_2 -ben, ..., b_n a J_n -ben benne fekszik-e. Keresünk egy olyan mennyiséget, amelynek (relatív) várható értéke minden statisztikában ugyanaz, mint annak valószínűsége, hogy b_1, b_2, \dots, b_n rendre a J_1, J_2, \dots, J_n intervallumokban fekdjék.

Legyen az $f_v(x)$ függvény J_v -ben 1, egyebütt pedig 0; ekkor az $f_v(b_v)$ mennyiségek valamennyien egyszerre mérhetők és a 0, 1 értékeket veszik fel. A mi esetünk akkor következik be, ha mindegyikük 1-gyel egyenlő. Ennek alapján képezhetjük az $f_1(b_1) \cdot f_1(b_1) \cdot f_2(b_2) \cdot \dots \cdot f_n(b_n)$ mennyiséget (vö. az V. § végével); ez a 0,1 értékeket veszi fel, és a mi esetünkben az jellemzi, hogy 1 az értéke. Ezen mennyiség (relatív)

várható értéke tehát annak (relatív) valószínűségét adja, hogy b_1, b_2, \dots, b_n rendre a J_2, J_2, \dots, J_n közökben fekszenek.

Ha a b_1, b_2, \dots, b_n mennyiségek operátorai rendre T_1, T_2, \dots, T_n az $F_1(\lambda), F_2(\lambda), \dots, F_n(\lambda)$ egységfelbontásokkal, úgy $f_v(b_v)$ operátora $f_v(T_v) = F_v(J_v)$. Eszerint az imént bevezetett $f_1(b_1) \cdot f_2(b_2) \cdot \dots \cdot f_n(b_n)$ mennyiség operátora (vö. V. §)

$$F = F_1(J_1) \cdot F_2(J_2) \cdot \dots \cdot F_n(J_n).$$

Ezzel egyszersmind alátámasztottunk egy a VI. §-ban tett megjegyzést: ha $F=0$, úgy annak várható értéke, azaz a fenti mérési eredmények valószínűsége minden statisztikában 0-sal egyenlő.

Térjünk vissza feladatunkhoz. Az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság statisztikájának függetlennek kell lennie attól, hogy az azt létrehozó mérések mimódon történtek, azaz: miként nyert megállapítást, hogy az a_1, a_2, \dots, a_m mennyiségek rendre az I_1, I_2, \dots, I_m közökben fekszenek. Ha tehát b olyan mennyiség, amelynek mérése ezen megállapításokkal (vagyis az $f_\mu(a_\mu)$ -k mérésével, ahol az $f_\mu(x)$ függvény I_μ -ben 1, egyebütt pedig 0) egyidejűleg lehetséges, úgy nincs akadálya, hogy pl. a b mennyiségek mérése is egyidejűleg megtörtént legyen. Ha speciálisan b operátora abszolút diszkrét és nem-elfajult (vö. VI. §), úgy mérése máris az állapot pontos meghatározását jelenti; ha ezen operátor sajátfüggvényei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, úgy a rendszernek a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok valamelyikében kell helyet foglalnia. Minthogy az $f_\mu(a_\mu)$ -k a b -kkel felcserélhetők, innen (mint arról könnyen meggyőződhetünk) következik, hogy $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sajátfüggvényei az $f_\mu(a_\mu)$ operátoroknak, az $f_\mu(a_\mu)$ mennyiségek ezen állapotokban tehát éles eloszlással rendelkeznek. Az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság nyilvánvalóan azon rendszerek kiválasztásával állt elő, amelyekben $f_\mu(a_\mu)$ ezen (éles) értékei valamenynyien 1-gyel egyenlők.

Az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaság tehát egyszerűen keveréke némelyeknek a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok közül (ti. azoknak, amelyekben valamennyi $f_\mu(a_\mu)$ mennyiség az éles 1 értékkel rendelkezik), másképpen: keveréke az azokhoz tartozó homogén sokaságoknak (vö. IV. §). Azt, hogy az egyes $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok milyen arányban lépnek fel az $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ keverékben, a b mennyiség azon elvégzett újólágos mérésének kell megmutatnia (minthogy b -t $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ létrehozásakor már egyszer mértük, és azóta semmi sem történt, most ismét ugyanazon eredménynek kell adódnia, vö. [31]). Ezen mérés eredményét azonban előre jelezhetjük: ha a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotokhoz rendre a w_1, w_2, \dots sajátértékek tartoznak és a J_1, J_2, \dots intervallumokat oly módon választjuk, hogy J_p tartalmazza w_p -t, de csak ezt tartalmazza ($p=1, 2, \dots$), úgy akkor állunk szemben φ_p -vel, ha b bennefekszik J_p -ben. Legyen b operátora T , a megfelelő egységfelbontás pedig $F(\lambda)$, úgy ennek (relatív) valószínűsége egyenlő az $F(J_p) = P_{\varphi_p}$ mennyiséghez tartozó operátor (relatív) várható értékével. Ez a várható érték, mint tudjuk, $Q(\varphi_p, U\varphi_p)$ -vel egyenlő. Ezen megfontolásokat felhasználhatjuk U meghatározására, ha alkalmasan választjuk b -t. Legyen ψ_1, ψ_2, \dots egy ortonormált rendszer E belsejében, mely egy abban mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszít ki [35]. Ezt azután kiegészíthetjük egy $\psi_1, \psi_2, \dots, \chi_1, \chi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszerré, mely olyan tulajdonságú, hogy elemeinek mindegyike vagy $E_\mu(I_\mu)$ belsejében, vagy annak külsejében fekszik ($\mu=1, 2, \dots, m$) [36]. Ezt a rendszert így jelöljük: $\varphi_1, \varphi_2, \dots$; válasszunk bizonyos w_1, w_2, \dots (egymástól különböző, a végesben torlódási ponttal nem rendelkező) valós számokat, és képezzük azt a normális operátort, melynek sajátfüggvényei $\varphi_1, \varphi_2, \dots$, a megfelelő sajátértékek pedig w_1, w_2, \dots . Ezen operátor jele legyen T . T abszolút diszkrét és nem-

elfajult; tartozzék ez a b mennyiséghez. Minthogy T sajátfüggvényei valamennyien vagy $E_\mu(I_\mu)$ belsejében, vagy annak külsejében fekszenek, azaz: sajátfüggvényei ezen egységoperátorok, T valamennyi $E_\mu(I_\mu)$ -vel teljesen felcserélhető. Azaz: annak eldöntése, vajon az egyes α_μ -k bennefekszenek-e a megfelelő I_μ -kben, b mérésével egyidejűleg lehetséges.

Erre a b -re alkalmazható tehát fenti megfontolásunk. A $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok két csoportba (ψ_1, ψ_2, \dots és χ_1, χ_2, \dots) oszthatók; az első csoport minden eleme E belsejében fekszik, az utóbbi csoport mindegyik eleme legalább egy $E_\mu(I_\mu)$ -nek a külsejében fekszik, így tehát a külsejében fekszik E -nek is. Így $Q(\varphi, E\varphi)$ az első csoportban 1-gyel, a másodikban 0-val egyenlő; az első csoport tehát az, ahol az α_μ mennyiségek rendre az egyes I_μ közből fekszenek. Így tehát az $\{\mathfrak{E}'_1, \mathfrak{E}'_2, \dots\}$ sokaság olyan keveréke a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotoknak, amelyekben ezen állapotok relatív súlya rendre $Q(\varphi_p, U\varphi_p)$ [37].

A φ_p állapot statisztikáját a P_{φ_p} operátor írja le, mégpedig a helyes normálásban; az $\{\mathfrak{E}'_1, \mathfrak{E}'_2, \dots\}$ sokaság statisztikájának leírását az U operátor adja, mégpedig ugyanazon (esetleg helytelen) normálásban, amelyben a φ_p állapotok súlyait a $Q(\varphi_p, U\varphi_p)$ mennyiségek adják. Ha tehát azon mennyiség várható értékét vesszük szemügyre, amelynek operátora P_χ ($Q(\chi)=1$, egyébként χ tetszőleges), úgy fenn kell hogy álljon

$$Q(\chi, U\chi) = \sum_p Q(\varphi_p, U\varphi_p) Q(\chi, P_{\varphi_p}\chi) = \sum_p Q(\varphi_p, U\varphi_p) |Q(\varphi_p, \chi)|^2.$$

Innen (vegyük tekintetbe, hogy ebben az egyenletben U -n kívül csak a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ ortonormált rendszer játszik szerepet, és ez utóbbi, míg E belsejében fekszik és abban mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszít ki, teljesen tetszőleges) azonban az $EU = UE = U$ összefüggést figyelembe véve könnyű számítással adódik a következő, hogy U és E egy állandó tényezőtől eltekintve megegyeznek [38]. Az utóbbi minthogy U és E definit operátorok, szükségképpen tehát U -ból minden további nélkül elhagyható, és így $U = E$ írható.

VIII. A hetedik paragrafus végeredménye döntő fontosságú: lehetővé teszi számunkra, hogy valamely mérési eredményből adódó statisztikus konzekvenciákat megállapítsuk.

Legyen $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ és b_1, b_2, \dots, b_n $m+n$ számú mennyiség, I_1, I_2, \dots, I_m , J_1, J_2, \dots, J_n pedig $m+n$ intervallum; amennyiben az összes megállapítás, vajon α_μ benne fekszik-e I_μ -ben ($\mu=1, 2, \dots, m$), szimultán lehetséges, és ha ugyanez ama megállapításokra is érvényes, hogy vajon a b mennyiség J_v -ben fekszik-e (a két csoportra vonatkozó megállapításoknak nem kell szimultán lehetségesnek lenniök!), úgy megkérdeshetjük: mi a (relatív) valószínűsége annak, hogy minden egyes b_v , a megfelelő J_v -ben fekszenek ($v=1, 2, \dots, n$), ha tudjuk, hogy mindegyik α_μ a megfelelő I_μ -ben fekszik ($\mu=1, 2, \dots, m$)?

Az α_μ, b_v mennyiségek operátorai legyenek S_μ , ill. T_v , a megfelelő egységfelbontások pedig $E_\mu(\lambda)$, ill. $F_v(\lambda)$. Feltevéseink szerint az $E_\mu(I_\mu)$ operátoroknak egymás között, és ugyanúgy az $F_v(J_v)$ operátoroknak egymás között felcserélhetőeknek kell lenniök; ennek megfelelően az

$$E = E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m), \quad F = F_1(J_1) \cdot F_2(J_2) \cdot \dots \cdot F_n(J_n)$$

operátorok egységoperátorok.

Azt a statisztikát, amely a „mindegyik α_μ a megfelelő I_μ -ben fekszik,

$\mu = 1, 2, \dots, m''$ ismeret alapján áll elő, az E operátor írja le (VII. §), azon mérési eredménynek, mely szerint „minden egyes b_v a megfelelő J_v -ben fekszik, $v = 1, 2, \dots, n''$ ” az F operátorral reprezentált mennyiség (relatív) várható értéke adja meg a valószínűségét (VII. § kezdete). Térjünk át valamilyen módon a \mathfrak{H} tér \mathfrak{H}_0 realizációjára; E, F mátrixai legyenek $\{e_{\varrho\sigma}\}$, ill. $\{f_{\varrho\sigma}\}$; ekkor a keresett (relatív) valószínűség, ill. az említett (relatív) várható érték

$$E(F) = \sum_{\varrho\sigma} e_{\varrho\sigma} \overline{f_{\varrho\sigma}}.$$

Ezt a kifejezést kell egyszerű és zárt alakra hoznunk.

A \mathfrak{H}_0 tér $(1, 0, 0, \dots), (0, 1, 0, \dots), \dots$ pontjai teljes ortonormált rendszert képeznek; azt \mathfrak{H} -ban jelölje $\varphi_1, \varphi_2, \dots$. Minthogy E, F egységoperátorok, mátrixaik megegyeznek önmaguk négyzetével. Ennek alapján kapjuk [39]:

$$\begin{aligned} \sum_{\varrho\sigma} e_{\varrho\sigma} \overline{f_{\varrho\sigma}} &= \sum_{\varrho\sigma\tau\omega} e_{\varrho\tau} e_{\tau\sigma} \overline{f_{\varrho\omega} f_{\omega\sigma}} = \sum_{\varrho\sigma\tau\omega} e_{\varrho\tau} \overline{f_{\varrho\omega}} \cdot \overline{e_{\sigma\tau} f_{\omega\sigma}} = \sum_{\tau\omega} \left| \sum_{\varrho} e_{\varrho\tau} \overline{f_{\varrho\omega}} \right|^2 \\ &= \sum_{\tau\omega} |Q(E\varphi_\tau, F\varphi_\omega)|^2 = [E, F]. \end{aligned}$$

A keresett relatív valószínűség tehát

$$[E, F] = [E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m), F_1(J_1) \cdot F_2(J_2) \cdot \dots \cdot F_n(J_n)],$$

s ez éppen a K.M.M. XIII. §-ában a valószínűségekre javasolt képlet. Azt, hogy ez a kvantummechanika szokásos valószínűség-képleteit speciális esetként magában foglalja, ott (XIII., XIV. §§) kifejtettük; eredményünk tehát összhangban van a tapasztalattal.

Az $\{\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2, \dots\}$ fundamentális sokaságot (vö. a II. § kezdetével), melyben \mathfrak{S} minden lehetséges állapota egyenlő gyakorisággal, elemi rendezetlenségben fordul elő — ez a képviselője az olyan \mathfrak{S} rendszernek, amelynek állapotáról semmit sem tudunk —, megvizsgálhatjuk: milyen statisztikus tulajdonságokkal rendelkezik? Azaz: meghatározhatjuk az egyes φ állapotok *a priori* valószínűségeit. Keressük azt az U operátort, amely ezen sokaság statisztikáját leírja; a fentiek szerint ez az operátor az 1 [40]. Annak (relatív) valószínűsége, hogy \mathfrak{S} a φ állapotba menjen át, azaz pl. hogy egy abszolút diszkrét nem-elfajult a mennyiség mérésekor, amelyhez a φ sajátfüggvény tartozik, a φ -nek megfelelő sajátérték adódjék (a operátora legyen S , ez utóbbi egységfelbontása $E(\lambda)$, I pedig olyan intervallum, mely S sajátértékei közül csak a φ -hez tartozót tartalmazza), minthogy $P_\varphi = E(I)$,

$$E(P_\varphi) = Q(\varphi, 1\varphi) = Q(\varphi, \varphi) = 1.$$

Azaz: minden φ -hez ugyanaz a (relatív *a priori*) valószínűség tartozik, az 1 [41].

Egyébként $\{\mathfrak{S}_1, \mathfrak{S}_2, \dots\}$ ($U=1$) statisztikája oly módon is nyerhető, hogy választunk valamely $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszert, és az egyes $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok homogén sokaságait 1:1:... arányban keverjük (ennek lehetőségét az $1 = P_{\varphi_1} + P_{\varphi_2} + \dots$ összefüggés fennállása biztosítja).

Hasonló módon okoskodhatunk az olyan $\{\mathfrak{S}'_1, \mathfrak{S}'_2, \dots\}$ sokaságok esetében, amelyeket az $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$ mennyiségek mérésével (e mennyiségek értékei fekszenek bizonyos I_2, I_2, \dots, I_m intervallumokban) jellemzünk. Most $U=E$, ahol E a VII. §-ban mondottak szerint képezendő egységoperátor. A φ állapot (relatív)

valószínűsége a korábbival teljesen analóg számítás szerint $Q(\varphi, E\varphi)$; ez az E belsejébe eső φ -kre maximális ($=1$), s az E külsejébe eső φ -kre minimális ($=0$); az utóbbi állapotok ekkor nem léphetnek fel. Előállítható ez a sokaság oly módon, hogy a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok homogén sokaságait az $1:1:\dots$ arányban keverjük, ha $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ E belsejében olyan ortonormált rendszert képez, amely abban mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszít ki (ekkor ugyanis $E = P_{\varphi_1} + P_{\varphi_2} + \dots$).

Ezek az eredmények egyébként azt mutatják, hogy ugyanazt a statisztikus sokaságot a legkülönbébb állapotok keverésével előállíthatjuk; vagy azt is, hogy a legkülönbébb módokon létrehozott sokaságok statisztikusan (vagyis egyáltalán) azonos módon reagálnak. Látjuk továbbá, hogy valamely állapot (homogén sokaság) valóban csak akkor van meghatározva, ha belseje egydimenziós.

Befejezésül meghatározzuk még az $U=E$ segítségével jellemzett statisztika normálását oly módon, hogy kiszámítjuk az 1 mennyiséghez tartozó 1 operátor (relatív) várható értékét (IV. §, β). Ez így kapható: $E(1) = (E, 1) = [E] = E$ belsejének dimenziószáma. Eszerint a normálás akkor és csak akkor helyes magától, ha E belseje egydimenziós, azaz σ állapota egyértelműen meg van határozva; ez helyesbíthető ($[E]$ -vel osztva), ha E belseje végesdimenziós. Ha azonban végtelen-dimenziós, úgy a II. §-ban említett bonyodalom ténylegesen jelentkezik: minden várható érték meg van szorozva $+\infty$ -nel, helyesbítésre tehát nincs lehetőség.

Összefoglalás

IX. Ennek a dolgozatnak az volt a célja, hogy megmutassa: a kvantummechanika a közönséges valószínűségszámítással nem csupán összefér, hanem azt feltételezve — és hozzávéve néhány plauzibilis ténybeli feltevést — egyenesen az egyetlen lehetséges megoldást nyújtja. Az alapul vett feltevések a következők voltak:

1. Minden mérés változást eredményez a mérésnek alávetett objektumon, és így két mérés kölcsönösen mindig zavarja egymást — ha nem így van, akkor a kettő egyetlen méréssel helyettesíthető.
2. A mérés okozta változás azonban olyan jellegű, hogy ez a mérés maga érvényes marad, azaz: ha azt *közvetlenül* elvégzése után megismételjük, ugyanazt az eredményt kapjuk.

Ezen kívül egy formális feltevés:

3. A fizikai mennyiségek — bizonyos egyszerű formális szabályok betartása mellett — funkcionáloperátorok segítségével írandók le.

Ezen elvekből a kvantummechanika és annak statisztikája szükségszerűen következik.

Egyébiránt vegyük tekintetbe, hogy a kvantummechanika statisztikus, „akauzális” természetét egyedül a mérés (elvi!) elégtelensége határozza meg (lásd Heisenberg [2] és [4] alatt idézett dolgozatát); a magára hagyott rendszer (melyet nem zavar meg semmilyen mérés), az időben teljes mértékben kauzálisan fejlődik tovább: ha annak φ állapotát a $t=t_0$ időpontban ismerjük, úgy azt az időtől függő Schrödinger-egyenlet segítségével minden későbbi időpontra számítással meghatározhatjuk [42]. A kísérleteket tekintve azonban a statisztikus jelleg nem kerülhető el: minden kísérlethez található ugyan egy-egy állapot, mely ahhoz hozzátartozik, és amelyben annak eredménye egyértelműen meghatározott (éppen ilyen állapotot-

kat hoz létre, ha eredetileg nem ilyen volt jelen, maga a kísérlet); minden állapothoz találhatunk azonban „nem hozzáillő” kísérleteket, melyek elvégzése azt „szétrombolja” — és valószínűségi törvények szerint „hozzaálló” állapotok keletkezését eredményezi.

Még hátra volna megmutatni, hogy statisztikánk a valószínűségszámítás minden szabályának valóban eleget tesz. Ez azonban szükségtelen, minthogy tudjuk: valamely, bizonyos mérések segítségével leírt sokaságot egyedül az ezekhez tartozó egységoperátor határoz meg (ez a szóban forgó mérések eredményeihez tartozó valószínűségek kiszámítását minden statisztikában lehetővé teszi), és ennek függését a megfelelő mérésektől lényegében már a K.M.M. XIV. §-ában tárgyaltuk (az emellett triviális is). A helyzetet teljesen áttekinthetővé teszi, hogy a VIII. § végén megadtuk, miként tevődnek össze e sokaságok az egyes állapotokból.

Fordította: Györgyi Géza

IRODALOM ÉS JEGYZETEK

[1] Vö. különösen *P. A. M. Dirac* több dolgozatával a *Proc. of Roy. Soc.* 1926/27 évfolyamaiban (főképpen **113**, 1927), valamint *P. Jordan*, *Zschr. f. Physik* **40**, 11/12 (1927) és **44**, 1/2 (1927). Vö. még *J. v. Neumann*, *Gött. Nachr.*, 1927. május 20-i ülés, valamint *Magyar Fizikai Folyóirat* **15**, 271 (1967).

[2] Az egyiknek a mérése befolyásolja a másikat, s a másikon esetleg előzetesen elvégzett mérés érvényességét megszünteti. Vö. pl. *Dirac*, *Proc. of Roy. Soc.* **112** (1926) és *Heisenberg*, *Zschr. f. Physik* **43**, 3/4 (1927) és *Magyar Fizikai Folyóirat* **15**, 87 (1967).

[3] A „hullámfüggvény” kifejezést *Schrödinger* hullámelméletéből kölcsönöztük; *Dirac* ezt egy bizonyos transzformációs mátrix egy soraként fogja fel, *Jordan* pedig a valószínűségi amplitúdó elnevezést használja.

[4] Így pl. *Jordan* szerint (*Zschr. f. Physik* **40**, 11/12) mind az összeadási, mind a szorzási tétel a „valószínűségi amplitúdókra” érvényes, nem pedig azok abszolútérték-négyzetére, azaz magukra a valószínűségekre. Vö. ezzel szemben *Heisenberg*, *Zschr. f. Physik* **43**, 3/4 és *Magy. Fiz. Foly.* **15**, 87 (1967).

[5] *Gött. Nachr.*, 1927. május 20-i ülés, valamint *Magyar Fizikai Folyóirat* **15**, 271 (1967).

[6] Az \mathfrak{S} rendszer fizikai szerkezete természetesen ismert; legyen az kezdetől fogva adott (\mathfrak{S} pl. egy harmonikus oszcillátor vagy egy hidrogén atom); amit nem tudunk, az \mathfrak{S} pillanatnyi állapota.

[7] Természetesen a értékeinek eloszlását az, hogy annak középértékét megadtuk, még nem határozza meg. Minthogy azonban a valamennyi hatványának középértékét, vagyis az eloszlás összes „momentumát” ismerjük, az eloszlás teljesen meg van határozva.

[8] Ezen a helyen térünk elő először lényegesen a klasszikus mechanikától. Két ilyen, esetleg független (ez az egyidejű mérhetőséggel nagyon is jól összefér) mennyiség visszavezetése egy harmadikra, mely utóbbinak azok függvényei, teljesen idegen a klasszikus mechanikától. Teljesen összeférhetetlen az a „szabadsági fok” fogalmával is: a és b (ha függetlenek) két szabadsági foknak felelnek meg, d azonban csak egynek.

Talán helyénvaló itt rámutatni, hogy a kvantummechanika a szabadsági fok fogalmát nem ismeri. Pl. az inhomogén elektromos térrel perturbált hidrogén atom (melynek magját az origóban rögzítve gondoljuk el) leírható három független mennyiséggel: az elektron koordinátaival, és egy-egy is: az összenergiával (minthogy ekkor nincs többé elfajulás!).

[9] Méltassuk figyelemre, hogy milyen mélyreható a kvantummechanikai statisztika e tulajdonsága: Legyen pl. adva egy elektron, melynek koordinátái q_1, q_2, q_3 , impulzuskomponensei p_1, p_2, p_3 , tömege pedig m . Az

$$\alpha(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2), \quad \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2), \quad \alpha(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2) + \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)$$

mennyiségek (ezek rendre: a szabad elektronnak a kezdőponttól alkalmas egységekben mért távol-

ság-négyszete, a szabad elektron mozgási energiája, a harmonikus oszcillátorban kötött elektron energiája) spektruma gyökeresen különböző: az első kettőhöz egy-egy folytonos, a harmadikhoz diszkrét spektrum tartozik; a három mennyiség között nincs kettő, mely egyidejűleg megfigyelhető volna. Ennek ellenére a két első várható értékének összege megegyezik a harmadik várható értékével. (Itt egyébként célszerű — hogy véges várható értékek adódjanak — a várható értékeket a rendszer rögzített állapotában képezni, vö. IV. §).

[10] Az olyan rendszerek esetében, amelyeknél mind a rendelkezésre álló tér, mind pedig a rendelkezésre álló potenciális energia véges, ez a bonyodalom alkalmasint általában nem lép fel. Mindazonáltal helyénvaló vele itt részletesen foglalkozni, minthogy a legjellegzetesebb kvantummechanikai rendszerek: a szabad elektron, a hidrogénatom stb. esetében felbukkan.

[11] Az ezután következőkben lényeges módon fel kell használnunk a K. M. M. fogalomalkotásait és terminológiáját. Azt, hogy a mondott függvények összessége \mathfrak{H} realizációját képezi (vagyis az összeadás, az állandóval való szorzás, és az ún. belső szorzás — a K. M. M. jelöléseivel: az $f+g$, $a \cdot g$, $Q(f, g)$ műveletek — megőrzése mellett \mathfrak{H} -ra kölcsönösen egyértelmű módon leképezhető), a K. M. M. IV. §-ában jeleztük s a VI. §-ban és a 2. függelékben bebizonyítottuk. (Ez *Fischer és Riesz F.* tétele.) Az absztrakt Hilbert-tér bevezetése az V., VI. §§-ban történik meg.

[12] A \mathfrak{H} térben ható operátorokról bővebbet lásd K. M. M. VII., VIII. §§. A sajátértékprobléma diszkusszióját a IX., X. §§ tartalmazzák.

[13] Hiszen a megfelelő mennyiség lehetséges értékei a sajátértékek, sőt, a valószínűségek kiszámításához még a sajátfüggvényeket is kell ismernünk! A K. M. M. XIV. §-ában megadott előállítás is feltételezi az operátorhoz tartozó egységfelbontásnak (melyet ott a IX. §-ban definiáltunk), azaz a sajátértékprobléma megoldásának ismeretét.

[14] A tényállás a következő: Valamely lineáris szimmetrikus operátor, mely egyáltalán előállítható sajátérték-alakban, csak egyféleképpen állítható ily módon elő (az operátorhoz pontosan egy egységfelbontás tartozik, vö. K. M. M., IX. §); minden „korlátos” (azaz folytonos) operátor, minden másodrendű differenciáloperátor eléggé reguláris együtthatókkal, s egyáltalán minden operátor, mely a kvantummechanikában valaha előfordult, előállítható sajátérték-alakban. Valós szimmetrikus lineáris operátorok esetére a sajátérték-előállítás létezését a szerző általánosságban bebizonyította (*Math. Ann.*), a komplex lineáris szimmetrikus operátorok esetében azonban, amelyek bennünket foglalkoztatnak, még bizonyos matematikai nehézségek állnak az általános bizonyítás útjában. Vö. még K. M. M. [12], [27].

[15] A megfordítást meglehetősen szerény mértékben fogjuk kihasználni; az alkalmasint aggályoskodás nélkül el is fogadható.

[16] A legutóbbi időkig nem is volt ismeretes olyan előírás, amely azt *általánosságban* meghatározza!

[17] Ha az a ([14] szerint nagyon valószínűtlen, ezidőszerint azonban nem kizárt) helyzet áll elő, hogy S, T, \dots normális operátorok, de $S+T+\dots$ nem az, úgy ez akadályt állít az $a+b+\dots$ mennyiség képzésének útjába. Ennek a korlátozásnak azonban számunkra nincs nagy jelentősége.

[18] Ha $f(x)=x^n$, úgy $f(S)$ értelme világos: az az n -szer ismételt alkalmazott S , azaz S^n ; innen adódik $f(S)$ értelme arra az esetre is, ha polinom. Tetszőleges $f(x)$ -re $f(S)$ a legkényelmesebben a K. M. M. XIV. §-ának második példája alapján nyerhető: ha S -hez az $E(\lambda)$ egységfelbontás

tartozik azaz $S = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda)$, úgy

$$f(S) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\lambda) dE(\lambda);$$

S normális volta előfeltétel tehát, s ennek alapján az, hogy $f(S)$ normális, könnyen bizonyítható.

[19] Azaz: mindazon x_1, x_2, \dots sorozatok tere, amelyekre $\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^2$ véges, vö. K. M. M. V. §.

[20] Ha f a \mathfrak{H}_0 tér x_1, x_2, \dots pontjának felel meg, úgy ez annyit jelent, hogy

$$\sum_{\mu\nu} u_{\mu\nu} x_{\mu} \bar{x}_{\nu} \cong 0,$$

vagyis az $\{u_{\mu\nu}\}$ mátrixhoz tartozó Hermite-féle alaknak nemnegatív-definitnek kel lennie; ezt a megjelölést visszük át az U operátorra.

[21] Fennál ugyanis:

$$Q(f, Sf) = Q(f, T^2 f) = Q(Tf, Tf) \cong 0.$$

[22] A kapcsolat $E(S)$ és U között természetesen függ attól, hogy \mathfrak{H}_0 miképpen valósítja meg \mathfrak{H} realizációját, azaz miképpen történt \mathfrak{H} leképezése \mathfrak{H}_0 -ra; ez pedig (végtelen) sokféleképpen lehetséges. Könnyen meg lehet mutatni, hogy ez a függés látszólagos, azaz U invariáns — ez azonban itt számunkra nem fontos.

[23] (Utólagos megjegyzés.) *H. Weyl* ugyancsak eljutott a „tisztá” sokaság — a mienkével megegyező — fogalmának felállításához (Zschr. f. Physik 46, 1/2). *Weyl* dolgozata is megadja a „tisztá” sokaságok statisztikájának teljes leírását, ennek megalapozását azonban — ami a mIII—IV. §§-beli megfontolásainknak felelne meg — nem tartalmazza. Közli továbbá *Weyl* e dolgozata a K. M. M. XIII. §-ában található képletek levezetését, kiindulva az összes állapot *a priori* egyenlő valószínűségi voltának feltevéséből, és feltételezve valamely általános térfogat-fogalom létezését a Hilbert-térben. (A jelen dolgozatban — vö. V., VI. §§ — egy attól független bizonyítást közlünk. Ez tanácsosnak látszhat, minthogy a Hilbert-térben valószínűleg nem létezik használható térfogat-fogalom.)

[24] Definit U -ra általánosan érvényes ugyanis

$$|Q(f, Ug)| \leq \sqrt{Q(f, Uf) Q(g, Ug)}$$

ennek bizonyítása ugyanúgy történik, mint a $Q(f, g)$ -re vonatkozó analóg összefüggése a K. M. M. [17] megjegyzésében. Ha $Q(f, Uf)$ nem > 0 , úgy $Q(f, Uf)$, tehát minden g -re (melyre Ug -nek értelme van!) $Q(f, Ug) = Q(Uf, g) = 0$. Így tehát fenn kell állnia $Uf = 0$ -nak.

[25] Bármely g -re fennáll ugyanis:

$$Q(S\varphi, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dQ(E(\lambda)\varphi, g) = wQ(\varphi, g), \quad Q(S\varphi - w\varphi, g) = 0;$$

úgyhogy $S\varphi - w\varphi$ zérus kell, hogy legyen. Az $S\varphi = w\varphi$ egyenlet fennállásából viszont következik:

$$Q((S - \lambda \cdot 1)\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} (\lambda - w)^2 dQ(E(\lambda)\varphi) = 0;$$

minthogy az integrandus sohasem negatív, és a d mögött álló kifejezés sohasem csökken, $\lambda > w$ és $\lambda < w$ mellett, mikor is az integrandus pozitív, az utóbb említett kifejezésnek konstansnak kell lennie. Azonban $\lambda \rightarrow \pm \infty$ esetén $Q(E(\lambda)\varphi)$ egyhez ill. zérushoz tart; annak tehát $\lambda \geq w$ mellett 1-gyel ill. 0-sal kell egyenlőnek lennie, és ebből következik, hogy $E(\lambda)\varphi = \varphi$ ill. 0. A δ alatt említett fontos tényre kétségkívül *Dirac* mutatott rá először, Proc. of Roy. Soc. 112, 1926.

[26] Mint könnyen belátható, fennáll:

$$f(s) \cdot g(S) = h(S),$$

ahol $h(x) = f(x) \cdot g(x)$ (valós x -ekre!). (Ezt az operátorok függvényeinek bármily definíciójától el kell várunk.)

[27] Legyen $f(x) = 1$ ill. 0, ha $x < \lambda$ ill. $\geq \lambda$; ekkor

$$f(S_\mu) = E_\mu(\lambda).$$

[28] Legyen szabad a teljes felcserélhetőségről a K. M. M.-ban mondottakat megismételünk. Belőle a közönséges felcserélhetőség ($S_\mu S_\nu = S_\nu S_\mu$) következik, korlátos S_μ -re pedig a közönséges felcserélhetőségnek folyománya a teljes felcserélhetőség. Nem-korlátos S_μ -re az ekvivalencia nincs bizonyítva; ez azonban abból ered, hogy ott nehézséget okoz a közönséges felcserélhetőséget értelmes módon definiálni (minthogy ekkor $S_\mu f$ -nek néha nincs értelme, vö. K. M. M. [27]). A teljes felcserélhetőség a felcserélhetőségnek éppen a megfelelő általánosítása tetszőleges (normális) operátorokra.

[29] A szerzőnek szándékában áll az operátor-függvényekre vonatkozó ezen és ezekkel rokon kérdésekre egy későbbi átfogó matematikai dolgozatban visszatérni.

[30] A szorzat helyett éppúgy szemügyre vehettük volna egyidejűleg megfigyelhető mennyiségek, azaz teljesen felcserélhető operátorok bármily más függvényét is. Az ilyenfajta dolgokkal azonban csak annyira részletesen kívánunk foglalkozni, amennyire az szükséges, és céljainkra az összeg s a szorzat elegendő.

[31] Valamely mérés elvi szempontból ugyan beavatkozás, azaz a mérés a vizsgált rendszert megváltoztatja (éppen ez az alapja a kvantummechanika „akauzális” jellegének, vö. *Heisenberg*,

Zschr. f. Physik 43, 3/4, 1927 és Magy. Fiz. Foly. 15, 87, 1967); feltehető azonban, hogy ez a változás a „a kísérlet érdekében” történik, azaz mielőtt a kísérletet elvégeztük, a rendszer olyan állapotban van, hogy *ugyanaz* a mérés a rendszer állapotának további megváltozása nélkül elvégezhető. Vagy: hogy ugyanazon mérés kétszeri elvégzésekor (ha közben nem történik semmi!) ugyanaz az eredmény adódik.

[32] K. M. M. VIII. §. 8. tétel szerint. A P_φ operátor belsejét ugyanis nyilvánvalóan a φ -vel arányos f -ek alkotják, és ezek (φ -vel együtt) benne fekszenek $1 - E_\mu(I_\mu)$ belsejében.

[33] Minden E egységoperátor definit: $E = E^2$; vö. [21].

[34] Újra látjuk, milyen mélyreható a méréssel kapcsolatosan az \mathfrak{S} rendszert ért beavatkozás: a mérés arra kényszeríti a rendszert, hogy átmenjen a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ állapotok valamelyikébe. Mindössze annyi szabadsága marad, hogy, hogy válasszon a $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ teljes ortonormált rendszer elemei között.

[35] A terminológia a K. M. M. V., VI. §§-t követi.

[36] Képezzük a 2^m számú $G_1 \cdot G_2 \cdot \dots \cdot G_m$ egységoperátort, ahol is a G_μ -k mindegyike vagy $E_\mu(I_\mu)$ -vel, vagy $1 - E_\mu(I_\mu)$ -vel egyenlő. Ezek mindegyikének belsejében válasszunk ki egy-egy ortonormált rendszert, mely abban mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszít ki (K. M. M. VI. § 6. tétel szerint, analógiában az ott közölt kiegészítéssel); $E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m)$ esetében ψ_1, ψ_2, \dots mellett maradunk. Mindezen rendszerek együttesen a K. M. M. VI. §-ának tételei szerint teljes ortonormált rendszert képeznek (mert 2^m számú egységoperátorunk páronként idegen és összegül 1-et ad), melynek ψ_1, ψ_2, \dots részét képezi. E rendszer mindegyik eleme bennefekszik valamelyik $G_1 \cdot G_2 \cdot \dots \cdot G_m$ belsejében, azaz $\mu = 1, 2, \dots, m$ mellett $G_\mu = E_\mu(I_\mu)$ vagy $1 - E_\mu(I_\mu)$ belsejében, vagy még másképpen: $E_\mu(I_\mu)$ belsejében vagy külsejében. Ezzel mindent elértünk, amit kívántunk.

[37] A χ_q -khoz természetesen a 0 súly tartozik, minthogy $U = UE$ folytán

$$Q(\chi_q, U\chi_q) = Q(\chi_q, UE\chi_q) = 0.$$

[38] Ezt pl. a következőképpen bizonyíthatjuk: Legyen φ_1, φ_2 két normált, ortogonális elem E belsejében. Egészítsük ki ezeket egy $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$ ortonormált rendszerré E belsejében, úgyhogy ott e rendszer mindenütt sűrű lineáris sokaságot feszítsen ki (ezt könnyű megtenni), és írjuk:

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2).$$

Egyenletünk ekkor alkalmazható, és kapjuk:

$$Q\left(\frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2), U\frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_1 + \varphi_2)\right) = Q(\varphi_1, U\varphi_1) \cdot \frac{1}{2} + Q(\varphi_2, U\varphi_2) \cdot \frac{1}{2},$$

$$Q((\varphi_1 + \varphi_2), U(\varphi_1 + \varphi_2)) = Q(\varphi_1, U\varphi_1) + Q(\varphi_2, U\varphi_2),$$

$$\Re Q(\varphi_1, U\varphi_2) = 0.$$

Minthogy a $\varphi_1, i\varphi_2$ elemek is normáltak és ortogonálisak, és E belsejébe esnek, ugyanígy igaz $\Im \cdot Q(\varphi_1, U\varphi_2) = 0$; tehát $Q(\varphi_1, U\varphi_2) = 0$. Azaz E belsejében $Q(f, g) = 0$ fennállásából következik $Q(f, Ug) = 0$, ha $Q(f) = Q(g) = 1$, de ezen korlátozás nélkül is. Mármost $Ug = EUg$ folytán (itt a g elem U belsejében fekszik) Ug benne fekszik E belsejében, és E belsejében minden olyan f -re ortogonális, amelyre a g elem ortogonális; így tehát Ug arányos g -vel. Fennáll: $Ug = \alpha_g \cdot g$ (g benne van E belsejében).

Ha g_1, g_2 benne fekszenek E belsejében ($g_1 \neq 0, g_2 \neq 0$), és nem ortogonálisak, úgy

$$Q(g_1, Ug_2) = \bar{\alpha}_{g_2} Q(g_1, g_2) \quad Q(Ug_1, g_2) = \alpha_{g_1} Q(g_1, g_2)$$

tehát $\alpha_{g_1} = \bar{\alpha}_{g_2}$. Így először is $\alpha_{g_2} = \bar{\alpha}_{g_2}$, azaz α_{g_2} valós, másodszor $\alpha_{g_1} = \alpha_{g_2}$. Ha ezzel szemben g_1, g_2 ortogonálisak, úgy azok egyike sem ortogonális $g = g_1 + g_2$ -re, és $\alpha_{g_1} = \alpha_{g_2} = \alpha_g$. Azaz: α_g konstanst E belsejében ($g \neq 0$ esetén, $g = 0$ mellett pedig tetszőleges), ekkor tehát $Ug = \alpha_g$. Minthogy Ef tetszőleges f -re E belsejében fekszik, fennáll: $Uf = UEf = \alpha Ef$. Így tehát

$$U = \alpha E,$$

amint állítottuk.

[39] K. M. M. XI. § jelöléseivel.

[40] Mondjuk azért, mert az $E = E_1(I_1) \cdot E_2(I_2) \cdot \dots \cdot E_m(I_m)$ szorzat, melynek U -t kellene adnia, üres vagyis nincs egy tényezője sem, miután mérés egyáltalán nem történt. Vagy ha valaki ezt a megfontolást ellenszenvesnek találja, úgy a következő ok miatt is: Legyen α valamely megnyísiég, S annak operátora, I a $-\infty, +\infty$ intervallum, $E(\lambda)$ pedig az S -hez tartozó egységfelbontás. Úgy gondolhatjuk, hogy α -t megmértük és azt találtuk, hogy az I -ben fekszik (ez éppen azt jelenti, hogy semmi sem történt); ekkor $E = E(I) = 1$.

[41] Figyelemre méltó körülmény a következő: \mathfrak{S} lehetséges állapotai (1 abszolútértékű konstans faktorok erejéig) a \mathfrak{H} Hilbert-tér egységömbjének felületét képezik; azaz: egy folytonos, végtelen sok dimenziós sokaságot. Ennek ellenére az *a priori* valószínűségek megadásakor nem kell a térfogat fogalmának definiálásával (ez a Hilbert-térben valószínűleg nem is lehetséges) foglalkoznunk — mint pl. a klasszikus mechanikában —, minthogy az egy alkalommal (azaz egy kísérlet esetében) szóba jövő φ -k (pl. egy teljes ortonormált rendszer elemei) mindig diszkrét sokaságot képeznek. Így minden φ -hez minden további magyarázat nélkül megadható egy-egy pozitív szám, mint annak *a priori* súlya.

[42] Ha H az energiaoperátor, úgy az időtől függő Schrödinger-egyenlet így fest:

$$H\varphi_t = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \varphi_t$$

(φ_t a rendszer állapota a t időben). Innen azonnal következik:

$$\varphi_t = e^{\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H} \varphi_{t_0}.$$

Az $e^{\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)H}$ operátort pontosan ugyanúgy kell képezni H -ból és az

$$f(x) = e^{\frac{2\pi i}{h}(t-t_0)x}$$

függvényből, amint azt [18] alatt valós értékű $f(x)$ függvényekre leírtuk. Minthogy ez az $f(x)$ nem valós értékű (ami az ott adott definíció alkalmazhatóságát nem érinti), $f(H)$ nem szimmetrikus [$|f(x)| = 1$ folytán azonban „ortogonális” (unitér; a ford. megj.)].

K Ö Z L E M É N Y

A Magyar Tudományos Akadémia Műszaki Tudományok Osztálya, a Magyar Tudományos Akadémia Automatizálási Kutató Intézete és a Méréstechnikai és Automatizálási Tudományos Egyesület az IFAC (Nemzetközi Automatika Szövetség) védnöksége alatt, 1968. április 9. és 11-e között Budapesten,

„Az impulzus-gyakoriság és impulzus-számosság jelek az automatizálásban”

témában nemzetközi szimpóziumot rendez.

A szervező bizottság felhívást intéz a terület művelőihez a következő tárgykörökben írt dolgozatok benyújtására:

impulzus-gyakoriság és impulzus-számosság jel automatizálási alkalmazásai,
digitális differenciál analizátorok,
növekményes és számlálástechnikai számítási módszerek,
a fentiek tervezési és kivitelezési módjai,
az impulzus-gyakoriság és impulzus-számosság jel alkalmazásának relatív előnyei,
a különféle megvalósítási módszerek relatív előnyei.

A szimpóziummal kapcsolatos mindennemű felvilágosítást a szimpózium irodája: MTA Automatizálási Kutató Intézete, Budapest XI., Kende u. 13—17, Molnár Kornélia, tel.: 267—828, ad. Jelentkezési határidő a szerzők részére 1967. május 31, a dolgozat 15—20 soros tartalmi összefoglalójával.

A szimpóziumon részt venni szándékozóknek, kívánságra előzetes jelentkezési lapot küldünk.

Technikai szerkesztő: Turchányi György Műszaki szerkesztő: Merkly László
A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója
A kézirat beérkezett: 1967. VI. 16. — Példányszám: 550 — Terjedelem: 9,1 (A/5) ív

67-5667 — Szegedi Nyomda

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Pál Lénárd</i> : Szilárdtestkutatás a Szovjetunióban	401
<i>I. M. Frank</i> : Az áthaladási sugárzás és az anyag optikai tulajdonságai	411
<i>Tóth Árpád</i> : AUFS típusú membránszűrő és néhány rost-szűrő radonbomlástermék-szűrési hatásfokának meghatározása	435
<i>Kertész László, Hajdu János és Hemela József</i> : Kis átmérőjű fémek kristályok húzása olvadékból	447
<i>Zsolnay Éva—Máthé György</i> : A jelformálás hatása impulzusalak diszkriminátor szeparációs tulajdonságaira	453
<i>Makra Zsigmond</i> : Neutronlassításon alapuló egyenletes érzékenységű neutronfluxus-mérők	461

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>Neumann János</i> : A kvantummechanika valószínűségelméleti felépítése	481
---	-----

KÖNYVISMERTETÉS

<i>D. H. Martin</i> : Magnetism in solids (<i>Pál Lénárd</i>)	479
<i>J. Kvasnica</i> : Physical Fields (<i>H. T.</i>)	446
<i>P. Kratochvil</i> : Crystals (<i>T. Gy.</i>)	446

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
JÁNOSSY LAJOS

XV. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ BUDAPEST
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1967

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK

FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: BUDAPEST, V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Iyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A Klasszikus Irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelem.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus
Budapest, XII., Konkoly Thege út
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

Minden szerzőt munkájáért 100 különlenyomat illeti meg. Több szerző esetén összesen 150 különlenyomatot adunk.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött és el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként belföldi címre 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány utca 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Kútkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám: 43-790-057-181) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítése a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázó szöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

ELFAJULT KVANTUMMECHANIKAI SAJÁTÉRTÉKFELADATOK*

GYÖRGYI GÉZA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet

Bevezetés

Az atommagok, valamint az elemi részecskék elméletének legújabb fejleményei ismét aláhúzták a csoportelméleti nézőpont fontosságát a kvantummechanikában. Kvantummechanikai sajátértékfeladatok csoportelméleti szerkezetét kívánjuk vizsgálni, az értekezés első részében azonban előkészítésképpen a megfelelő klasszikus mozgásproblémák szimmetriatranszformációit tárgyaljuk. A kétdimenziós harmonikus oszcillátor problémája (1a. szakasz) alkalmas keretként kínálkozik az SU_2 és az R_3 csoport a kvantumfizikában oly alapvető kapcsolatának (l. pl [1, 2, 3]) diszkussziójához. A klasszikus mechanikában centrális jelentőségű Kepler-problémát először ugyancsak két dimenzióra korlátozódva tárgyaljuk (1b. szakasz). Ezt azért tesszük, mert a síkbeli Kepler-probléma szimmetriacsoportját alkotó háromdimenziós térbeli transzformációk a szemlélet számára jól hozzáférhetők. A síkbeli eset ily módon előkészíti a térbeli Kepler-probléma tárgyalását, melynek szimmetriacsoportját négydimenziós térbeli transzformációk alkotják (1c. szakasz). A síkbeli és térbeli Kepler-probléma szimmetriatranszformációival a klasszikus elmélet keretei között a [4] dolgozat foglalkozik röviden. Olyan részletes tárgyalás, amint azt az értekezés tartalmazza, nem ismeretes előttünk az irodalomban. Így megadjuk a pálya és a hodográf egyenletének „szembeszökően kovariáns” megfogalmazását; megadjuk továbbá egy kinematikai modellt, mely a síkbeli, ill. a térbeli Kepler-problémának egy tömegpont három-, ill. négydimenziós gömbfelületen végzett tehetetlenségi mozgását felelteti meg. Ezen modell koordináta- és impulzusváltozói a kvantumelméleti tárgyalásban fontosaknak bizonyulnak majd. Nem foglalkozik az értekezés azzal, hogy a tárgyalt szimmetriatranszformációkat beillesse a kontakt transzformációk általános elméletének kereteibe (ez utóbbival kapcsolatosan az [5] munkára utalunk). Az n -dimenziós izotróp harmonikus oszcillátor szimmetriacsoportját, az SU_n csoportot röviden tárgyaljuk (1d. szakasz). A második rész tárgya: egyszerű kvantummechanikai sajátértékfeladatok csoportelméleti szerkezetének vizsgálata. A 2a. szakasz a kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor elfajult sajátértékfeladata és az impulzusmomentum kvantumelmélete között fennálló kapcsolatot tárgyalja, legnagyobb részt *Schwinger* alapvető munkája [6] nyomán, tekintetbe véve azonban más szerzők dolgozatait is [4, 7, 8, 9]. A Coulomb-tér (H atom) sajátértékfeladatának magasabb szimmetriáival foglalkozó 2b. szakasz fejtegetéseihez az alapot természetesen *V. A. Fock* híres dolgozata [10], továbbá *Pauli* [11], *Hulthén* [12], *Bargmann* [13], *Alliluev* [9], munkái szolgáltatták. Mindenek előtt azzal a kérdéssel foglalkozunk, miért nem jut kifejezésre szembeszökően a probléma magasabb szimmetriája a szokásos, koordinátaábrázolásban

* Kandidátusi értekezés, 1964.

végzett tárgyalás során, továbbá megvilágítjuk a Fock által alkalmazott sztereo-gráfikus projekció szerepét a magasabb szimmetria felismerésében. Bevezetve a klasszikus Kepler-pálya centrumára vonatkoztatott koordinátáknak megfelelő kvantummechanikai változókat, megadunk egy koordinátaábrázolásbeli tárgyalást, mely láthatóvá teszi a magasabb szimmetria jelenlétét. Végül *Allilujev* [9] megfontolásaihoz kapcsolódunk, aki megadta a H atom f dimenzióra általánosított Schrödinger-egyenletének megoldását, továbbá ezen probléma impulzustérbeli Schrödinger-egyenletét az $f+1$ dimenziós gömbfüggvények integrálegyenletének alakjára hozta. Mi az *Allilujev* által tárgyalt problémának az operátorok algebrai (felcserelési) tulajdonságain alapuló tárgyalását adjuk meg, általánosítva ezzel *Pauli* [11] és *Hulthén* [12] módszerét. Megjegyezzük, hogy az $f=1$ esetnek az excitonok elméletében van jelentősége (l. [14]); az $f=2$ eset érdekessége abban áll, hogy az lényegében megegyezik az (egész számú) impulzusmomentum sajátértékfeladatával. Az $f=3$ esetben természetesen visszakapjuk a hidrogénatom elméletét. Itt említjük meg, hogy a *Mendeleejev*-féle periódusos rendszer (a magasabb rendszámoknál jelentkező „szimmetriasértő kölcsönhatás” elhanyagolása mellett) a probléma négydimenziós forgásszimmetriáját tükrözi vissza. Meglepő, hogy ezen tény említésével a tankönyvekben stb. nem találkozunk. Említésre érdemes továbbá a H atom, valamint a gömbi pörgettyű sajátértékfeladata között fennálló szoros rokonság, mely utóbbi ugyancsak négydimenziós forgásszimmetriát mutat. A 2b. szakasz megfontolásaihoz teljesen útmutatást nyújtott *Hund*nak az utóbbi problémát tárgyaló dolgozata [15]. A Kepler-probléma $f>3$ dimenzióban — ellentétben a harmonikus oszcillátorral — tudomásunk szerint csupán matematikai érdekességgel bír. A 2c. szakaszban a térbeli izotróp harmonikus oszcillátor problémájával kapcsolatban tárgyaljuk az SU_3 csoportnak az erős kölcsönhatásokban résztvevő részecskék elméletében (l. pl. [16]) szerepet játszó ábrázolásait. Foglalkozunk továbbá azzal a kérdéssel, hogy milyen feltevések alapján vezethető le a Gell—Mann—Okubo tömegképlet. Az értekezés harmadik részében a szimplektikus-invariáns sokfermion-feladatok rendszeres csoportelméleti tárgyalását adjuk. Az előzményeket illetően *Racah*, *Wada*, *Takano*, *Fukuda* (l. pl. [17]), *Mottelson* [18], *Baumann*, *Eder*, *Thirring* és *Sextl* [19], valamint *Lipkin* [20] és *Nogami* [21] dolgozataira utalunk. Megjegyezzük, hogy itt a bevezetésben teljes áttekintését adtuk a felhasznált munkáknak, az értekezésben tárgyalt kérdések általunk ismert szakirodalmi előzményeinek; a tárgyalást nem szakítjuk meg irodalmi hivatkozásokkal.

A Lie-csoportoknak a kvantummechanikában betöltött szerepe számos érdekes kérdést vet fel, melyek közül itt néhányat szeretnénk érinteni. Meglepőnek találhatjuk, hogy pl. a háromdimenziós forgáscsoporttal a legkülönbözőbb problémák esetében találkozunk: az impulzusmomentum kvantummechanikáján kívül, ahol megjelenése természetes, a kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor, a síkbeli Kepler-probléma, az izospin, vagy a szimplektikus invariáns sokfermion-feladatok kvázispinje esetében. Ennek magyarázatát az egyszerű kompakt Lie-csoportok Cartan-féle osztályozása alapján találhatjuk meg. Eszerint a háromdimenziós forgáscsoport Lie-algebrája az egyetlen kompakt egyszerű Lie-algebra, melynek rangja 1. Egy tömegpont térbeli mozgása esetében 2 rangú kompakt Lie-csoportok fellépte várható. Ilyenek: SU_3 , O_4 , O_5 , valamint a G_2 kivételes csoport. Az első kettővel a térbeli izotróp harmonikus oszcillátor és a Kepler-probléma esetében találkozunk. A két utóbbi csoport infinitezimális generátorainak száma nagyobb, ezért ezek egy tömegpont mozgása esetében nem jutnak szerephez. Más problémák-

nál azonban szerepük lehet; így az $\frac{1}{2}$ izospinű fermionok szimplektikus-invariáns sokrészecske-feladataiban a kvázispin-csoport szerepét O_5 tölti be.

Az oszcillátor, az impulzusmomentum, a H atom példája azt mutatja, hogy a Lie-csoportok fogalma szorosan összefonódik a kvantumjelenségekkel. Az anyagi világ felépítésének is lényeges vonásait tükrözik vissza a Lie-csoportok, a mint azt a periódusos rendszer és a négydimenziós forgáscsoport, továbbá az erős kölcsönhatásban résztvevő részecskék rendszere és az SU_3 csoport kapcsolata mutatja. Az atommagok felépítésében nem ismeretes annyira határozottan kifejeződő csoportelméleti szerkezet. Ha az oszcillátormodell spinpálya-kölcsönhatás nélkül alkalmazható volna a magokra, a magok héjszerkezetét is az SU_3 csoport határozná meg. Nézetünk szerint indokoltak lennének az erőfeszítések egy olyan elfajult sajátérték-probléma megszerkesztésére, s csoportelméleti szerkezetének megismerésére, amelyben a szintlezáródások a tapasztalatból ismert mágikus számoknál adódnak. Ez, azonkívül, hogy a mágikus számoknak csoportelméleti jelentést adna, lehetővé tenné a forgási állapotok mikroszkopikus leírását a spin figyelmen kívül hagyása nélkül.

1. Szimmetriatranszformációk a klasszikus mechanikában

1a. Az izotróp harmonikus oszcillátor két dimenzióban

A kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor Hamilton-függvénye:

$$H = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x_1^2 + x_2^2). \quad (1)$$

A Hamilton-féle kanonikus mozgásegyenletek:

$$\frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{x}_k, \quad -\frac{\partial H}{\partial x_k} = \dot{p}_k \quad (k = 1, 2). \quad (2)$$

Ide behelyettesítve (1)-et kapjuk:

$$p_k = m\dot{x}_k, \quad -m\omega^2 x_k = \dot{p}_k. \quad (3)$$

Vezessük be most az új

$$\alpha_k = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(x_k + \frac{i}{m\omega} p_k \right) \quad (4)$$

komplex változókat. Az (1) Hamilton-függvényt ezekkel kifejezve kapjuk:

$$H = \omega (\alpha_1^* \alpha_1 + \alpha_2^* \alpha_2). \quad (5)$$

Az α_k változókra az egyszerű alakú

$$\dot{\alpha}_k = -i\omega \alpha_k \quad (6)$$

mozgásegyenletek érvényesek. A megoldások közvetlenül felírhatók:

$$\alpha_k(t) = \alpha_k(0) e^{-i\omega t}. \quad (7)$$

Itt $\alpha_k(0)$ tetszőleges komplex szám lehet, mely a kezdeti feltételek előírásaival rögzíthető.

Fordítsuk figyelmünket a mozgásállandókra. Mozcásállandó mindenek előtt az (5) Hamilton-függvény (energia). De mint az (7) behelyettesítésével belátható, mozgásállandó minden

$$\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^2 \sigma_{ij} \alpha_i^* \alpha_j \quad (8)$$

hermitikus alak is; itt a σ_{ij} -k tetszőleges komplex számok lehetnek. A (8) típusú mozgásállandók között — az indexek $i, j = 1, 2$ értékeinek megfelelően — négy lineárisan függetlent találhatunk. Ilyenek pl. $\alpha_1^* \alpha_1, \alpha_1^* \alpha_2, \alpha_2^* \alpha_1, \alpha_2^* \alpha_2$; ez volna a leg-egyszerűbb választás. De képezhetjük a szimmetrikusabb

$$\frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_1 - \alpha_2^* \alpha_2), \quad (9a)$$

$$\frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_2 + \alpha_2^* \alpha_1), \quad \frac{1}{2i} (\alpha_1^* \alpha_2 - \alpha_2^* \alpha_1), \quad \frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_1 + \alpha_2^* \alpha_2), \quad (9b)$$

alakokat is. A fizikai értelmezés szempontjából előnyös, hogy ezek — szemben az $\alpha_i^* \alpha_j$ -kel — valamennyien valósak. Az első közülük az energia $1/2\omega$ -szorosa. A másik három jelentése az α_j változó (4) alakját behelyettesítve ismerhető fel:

$$\frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_2 + \alpha_2^* \alpha_1) = \frac{1}{2\omega} \left(\frac{p_1 p_2}{m} + m\omega^2 x_1 x_2 \right), \quad (10a)$$

$$\frac{1}{2i} (\alpha_1^* \alpha_2 - \alpha_2^* \alpha_1) = \frac{1}{2} (x_1 p_2 - x_2 p_1), \quad (10b)$$

$$\frac{1}{2} (\alpha_1^* \alpha_1 - \alpha_2^* \alpha_2) = \frac{1}{2\omega} \left[\frac{p_1^2 - p_2^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x_1^2 - x_2^2) \right]. \quad (10c)$$

Itt a (10c) kifejezés az x_1 - és x_2 - tengelymenti oszcillációk $1/2\omega$ -val szorzott energiáinak különbsége. Ez a két energia az x_1 - és x_2 -tengelymenti oszcillációk függetlensége folytán külön-külön mozgásállandó. Összegük, az összenergia mellett különbségük is állandó tehát. A (10b) kifejezés az impulzusmomentum $1/2$ -szerese, mely tetszőleges centrális mozgás esetén állandó. A (10a) kifejezés az x_1 - és x_2 -tengelymenti mozgások korrelációját (fáziskülönbségét) méri. Ha pl. a két oszcilláció amplitúdója és fázisa egyenlő: $x_1 = x_2, p_1 = p_2$, (10a) egyenlő az energia $1/2\omega$ -szorosával, azonos amplitúdó és ellentétes fázis esetén ($x_1 = -x_2, p_1 = -p_2$) az energia $-1/2\omega$ -szorosával; általában (10a) az x_1 - és x_2 -tengelymenti oszcillációk energiáinak $1/\omega$ -val szorzott mértani közepe megszorozva ezen két oszcilláció fáziskülönbségének koszinuszával. A (10a) mennyiség állandósága ezen fáziskülönbség állandóságát tükrözi vissza. Megjegyezzük, hogy a (10c) és (10a) mennyiségek között hasonlóság ismerhető fel: míg az előbbi az x_1 - és x_2 -tengelymenti oszcillációk energiáinak, az utóbbi az $x_2 = \pm x_1$ egyenesek mentén végbemenő oszcillációk energiáinak különbsége, $1/2\omega$ -val szorozva.

Az α_1, α_2 változók (6) szerint azonos alakú mozgásegyenleteknek tesznek eleget. Minthogy ezek lineárisak, ugyanilyen mozgásegyenletek érvényesek bármely, az α_1, α_2 változók lineáris kombinációiként definiált új

$$\left. \begin{aligned} \alpha'_1 &= L_{11}\alpha_1 + L_{12}\alpha_2, \\ \alpha'_2 &= L_{21}\alpha_1 + L_{22}\alpha_2 \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

változókra is. A független α_1, α_2 változók helyett bevezetett új α'_1, α'_2 változók ugyan-csak függetlenek lesznek, ha az

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \quad (12)$$

mátrix determinánsa zérustól különböző: $\det \mathbf{L} \neq 0$. Az ilyen \mathbf{L} mátrixok, ill. a megfelelő lineáris transzformációk halmaza csoport. Neve: a G_2 általános lineáris csoport. A (6) mozgásegyenletek (11)-gyel szemben mutatott invarianciájának kifejezésére azt mondjuk, hogy a (11) transzformációk a (6) egyenletek *szimmetria-transzformációi*, s a G_2 csoport a mozgásegyenleteknek *szimmetriacsoportja*. Írjuk fel részletesen, miként transzformálja (11) a koordinátákat és az impulzusokat. Legyen $L_{22} = a - id$, $L_{21} = b - ic$, $L_{12} = e - ih$, $L_{11} = f - ig$. Kapjuk:

$$\left. \begin{aligned} p'_2 &= ap_2 + bp_1 - m\omega cx_1 - m\omega dx_2, \\ p'_1 &= ep_2 + fp_1 - m\omega gx_1 - m\omega hx_2, \\ x'_1 &= \frac{1}{m\omega} hp_2 + \frac{1}{m\omega} gp_1 + fx_1 + ex_2, \\ x'_2 &= \frac{1}{m\omega} dp_2 + \frac{1}{m\omega} cp_1 + bx_1 + ax_2. \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Megjegyezzük, hogy ezek a transzformációk az (1—2) kanonikus egyenleteknek általában nem szimmetriatranszformációi (nem kanonikus transzformációk). Azon lineáris transzformációk, amelyekkel szemben az (1—2) kanonikus egyenletrendszer invariáns, a következőképpen határozhatók meg. Vezessük be a szimmetrikusabb $z_{-k} = p_k$, $z_k = x_k$ jelölést. A (2) kanonikus egyenletek most így írhatók fel:

$$\dot{z}_k = \varepsilon_k \frac{\partial H}{\partial z_{-k}} \quad (k = -2, -1, 1, 2); \quad (14)$$

itt $\varepsilon_k = 1$, ha $k > 0$ és -1 , ha $k < 0$. Legyen

$$z'_i = \sum_{k=-2}^2 M_{ik} z_k, \quad (15)$$

ahol $\mathbf{M} = (M_{ik})$ nemszinguláris mátrix. Tegyük fel, hogy a (15) transzformáció kanonikus, azaz

$$\dot{z}'_i = \varepsilon_i \frac{\partial H'}{\partial z'_{-i}}, \quad (16)$$

ahol $H'(z'_k) = H(z_k)$. Számítsuk ki \dot{z}'_i -ot (14—15) felhasználásával. Közvetett diffe-

renciálást alkalmazva és tekintetbe véve, hogy $\partial z'_i / \partial z_k = M_{ik} \equiv M_{kl}^T$ (T a transzponált mátrix jele), kapjuk:

$$\dot{z}'_i = \sum_{k=-2}^2 M_{ik} \varepsilon_k \frac{\partial H}{\partial z_{-k}} = \sum_{k,l=-2}^2 M_{ik} \varepsilon_k M_{-k,-l}^T \frac{\partial H'}{\partial z'_{-l}}. \quad (17)$$

A (16–17) képleteket összehasonlítva nyerjük:

$$\varepsilon_i \delta_{il} = \sum_{k=-2}^2 M_{ik} \varepsilon_k M_{-k,-l}^T,$$

vagy

$$\varepsilon_i \delta_{i,-l} = \sum_{k,j=-2}^2 M_{ik} \varepsilon_k \delta_{k,-j} M_{jl}^T,$$

mely utóbbi képletnek a

$$\mathbf{J} = \mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^T$$

tömörebb alak is adható; itt $\mathbf{J} = (J_{ik})$, $J_{ik} = \varepsilon_k \delta_{k,-i}$. A (20) feltételt kielégítő \mathbf{M} mátrixot Weyl nyomán *szimplektikusnak* nevezik. A (20) feltételre vezet az is, ha megköveteljük, hogy a (15) transzformációval bevezetett új z'_i változókra

$$(z'_{-i}, z'_k) = \varepsilon_i \delta_{ik} \quad (21)$$

teljesüljön; itt a bal oldalon klasszikus Poisson-féle zárójel áll, melyet

$$(f, g) = \sum_k \varepsilon_k \frac{\partial f}{\partial z_{-k}} \frac{\partial g}{\partial z_k} \quad (22)$$

definiál.

Azt találtuk, hogy az (1–2) kanonikus egyenleteket változatlanul hagyó transzformációk csoportja a 4×4 -es valós szimplektikus mátrixokból áll. Neve: az Sp'_4 *valós szimplektikus csoport*.

Térjünk vissza a (11) transzformációkhoz. Szorítkozzunk G_2 transzformációi közül azokra, amelyek a (6) mozgásegyenletek alakja mellett az (5) energia (Hamilton-függvény) értékét is változatlanul hagyják. Az ilyen transzformációk mátrixát \mathbf{U} -val jelöljük. Ezen transzformációk alcsoportját alkotják G_2 -nek, és Sp'_4 -nek is.

A transzformációs képletet az $\underline{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$, $\underline{\alpha}' = \begin{pmatrix} \alpha'_1 \\ \alpha'_2 \end{pmatrix}$ kétdimenziós (komplex) vektorok felhasználásával az

$$\underline{\alpha}' = \mathbf{U} \underline{\alpha} \quad (23)$$

tömör alakba írjuk. Az energia invarianciájának feltétele:

$$\underline{\alpha}'^* \underline{\alpha} = (\mathbf{U}^* \underline{\alpha}^*) (\mathbf{U} \underline{\alpha}) = \underline{\alpha}^* \mathbf{U}^+ \mathbf{U} \underline{\alpha} = \underline{\alpha}^* \underline{\alpha}. \quad (24)$$

Tetszőleges $\underline{\alpha}$ -ra ez akkor és csak akkor teljesül, ha

$$\mathbf{U}^+ \mathbf{U} = \mathbf{E}, \quad (25)$$

azaz ha \mathbf{U} unitér. A (6) mozgásegyenleteket és az (5) energiát változatlanul hagyó (23) transzformációk csoportja a 2×2 unitér mátrixok alkotta U_2 *unitér csoport*. Az U_2 csoport az (1–2) kanonikus egyenletrendszernek is szimmetriacsoportja (elemei kanonikus transzformációk), és közös része a G_2 , Sp'_4 csoportoknak.

A (25) összefüggésből következik:

$$\det \mathbf{U}^+ \mathbf{U} = \det \mathbf{U}^+ \cdot \det \mathbf{U} = |\det \mathbf{U}|^2 = 1, \quad (26)$$

azaz

$$\det \mathbf{U} = \exp i\mu \quad (27)$$

(μ valós). Az $\mathbf{U}_0 = e^{-i\mu} \mathbf{U}$ mátrixra

$$\det \mathbf{U}_0 = 1 \quad (28)$$

teljesül, azaz: \mathbf{U}_0 unimoduláris. Eszerint bármely \mathbf{U} unitér mátrix előállítható mint egy egységnyi abszolút értékű $e^{i\mu}$ számszor egy unimoduláris unitér \mathbf{U}_0 mátrix. Az $e^{i\mu}$ tényező egyszerűen a mozgás fázisát változtatja meg (eltolást eredményez az időtengely mentén), a pálya alakját, térbeli elhelyezkedését nem érinti. A következőkben a 2×2 -es unimoduláris unitér mátrixokra, ill. a megfelelő (23) transzformációkra korlátozzuk figyelmünket. Ezen mátrixok is csoportot alkotnak; ez az SU_2 speciális (vagy unimoduláris) unitér csoport.

Valamely

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ U_{21} & U_{22} \end{pmatrix} \quad (29)$$

unimoduláris unitér mátrix a

$$\det \mathbf{U} = 1, \quad U_{11}U_{22} - U_{12}U_{21} = 1, \quad (30)$$

valamint az

$$\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^+, \quad \begin{pmatrix} U_{22} & -U_{12} \\ -U_{21} & U_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_{11}^* & U_{21}^* \\ U_{12}^* & U_{22}^* \end{pmatrix} \quad (31)$$

feltételeknek tartozik eleget tenni [(31) részletes felírása (30) figyelembevételével történt]. A (31) feltétel az

$$\left. \begin{aligned} U_{11}^* &= U_{22}, \\ U_{21}^* &= -U_{12} \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

egyenlőségek teljesülését követeli meg. Legyen

$$\left. \begin{aligned} U_{11} &= s - iv_3, \\ U_{21} &= v_2 - iv_1; \end{aligned} \right\} \quad (33a)$$

ekkor

$$\left. \begin{aligned} U_{22} &= s + iv_3, \\ U_{12} &= -v_2 - iv_1. \end{aligned} \right\} \quad (33b)$$

Az unimodularitás (30) feltétele most az

$$s^2 + v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = 1 \quad (34)$$

alakot ölti. A v_1, v_2, v_3 számhármass rövid szimbolikus felírására a \vec{v} vektorjelölést alkalmazzuk. A \vec{v} „vektor” $|\vec{v}| = \sqrt{v_1^2 + v_2^2 + v_3^2}$ abszolútértékének, valamint s -nek négyzetösszege (34) szerint egy. Van tehát olyan φ szög, amelyre fennáll

$$|\vec{v}| = \sin \frac{\varphi}{2}, \quad s = \cos \frac{\varphi}{2}. \quad (35)$$

Legyen $\vec{n} = \vec{v}/|\vec{v}|$; ekkor írható: $\vec{v} = \vec{n} \sin \frac{\varphi}{2}$. Bevezetve a

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (36)$$

Pauli-mátrixokat, s ezen mátrixhármas rövid felírására a szimbolikus $\vec{\sigma}$ vektorjelölést, a (33) elemekkel rendelkező (29) mátrix az

$$U(\vec{\varphi}) = \cos \frac{\varphi}{2} - i\vec{n}\vec{\sigma} \sin \frac{\varphi}{2} \quad (\vec{\varphi} = \vec{n}\varphi) \quad (37)$$

alakba írható. [Itt az első tag: $\cos \frac{\varphi}{2}$ -szer az $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ 2×2 -es egységmátrix; ezt azonban gyakran nem írjuk ki. Alternatív (37) helyett

$$U(\vec{\varphi}) = e^{-\frac{i}{2} \vec{\varphi} \cdot \vec{\sigma}} \quad (38)$$

is írható. A (37) és (38) alakok egyenértékűsége (39) figyelembevételével az exponenciális, szinusz és koszinusz függvények hatványsorait felhasználva látható be.] A Pauli-mátrixok fontos tulajdonságait fejezi ki a következő két összefüggés:

$$\sigma_i^+ = \sigma_i, \quad (39)$$

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk} \sigma_k. \quad (40)$$

(Itt ϵ_{ijk} minden indexpárban antiszimmetrikus, és $\epsilon_{123} = 1$; a kétszer fellépő indexre 1-től 3-ig összegezni kell.) A Pauli-mátrixok felhasználásával a (10) mozgásállandók rendre az $\frac{1}{2} \underline{\alpha}^* \sigma_i \underline{\alpha}$ ($i=1, 2, 3$) alakba írhatók. Ezen három mennyiség összefoglaló felírására az

$$\vec{S} = \frac{1}{2} \underline{\alpha}^* \vec{\sigma} \underline{\alpha} \quad (41)$$

vektorjelölést fogjuk alkalmazni. Mi történik \vec{S} -sel, ha az α_1, α_2 változókat a (23) transzformációnak vetjük alá?

Legyen $\vec{S}' = \frac{1}{2} \underline{\alpha}'^* \vec{\sigma} \underline{\alpha}'$. Írható:

$$\vec{S}' = \frac{1}{2} (\underline{U}^* \underline{\alpha}^*) \vec{\sigma} (\underline{U} \underline{\alpha}) = \frac{1}{2} \underline{\alpha}^* \underline{U}^+ \vec{\sigma} \underline{U} \underline{\alpha} = \frac{1}{2} \underline{\alpha}^* \vec{\sigma}' \underline{\alpha}, \quad (42)$$

ahol

$$\vec{\sigma}' = \underline{U}^+ \vec{\sigma} \underline{U}. \quad (43)$$

Foglalkozunk most a (43) transzformált mátrix-vektorral. Felhasználva (37)-et írható:

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}' &= \left(\cos \frac{\varphi}{2} + i\vec{n}\vec{\sigma} \sin \frac{\varphi}{2} \right) \vec{\sigma} \left(\cos \frac{\varphi}{2} - i\vec{n}\vec{\sigma} \sin \frac{\varphi}{2} \right) = \\ &= \vec{\sigma} \cos^2 \frac{\varphi}{2} - i[\vec{\sigma}(\vec{n}\vec{\sigma}) - (\vec{n}\vec{\sigma})\vec{\sigma}] \cos \frac{\varphi}{2} \sin \frac{\varphi}{2} + (\vec{n}\vec{\sigma})\vec{\sigma}(\vec{n}\vec{\sigma}) \sin^2 \frac{\varphi}{2}. \end{aligned} \quad (44)$$

Felhasználva (39)-et, a kétszeres vektorszorzat kifejtési tételét, valamint a szögfüggvényekre vonatkozó ismert összefüggéseket, kapjuk:

$$\vec{\sigma}' = (\vec{n}\vec{\sigma})\vec{n} + (\vec{n} \times \vec{\sigma}) \times \vec{n} \cos \varphi + \vec{n} \times \vec{\sigma} \sin \varphi. \quad (45)$$

Ezt (42)-be helyettesítve, majd (41)-et figyelembe véve adódik:

$$\vec{S}' = (\vec{n}\vec{S})\vec{n} + (\vec{n} \times \vec{S}) \times \vec{n} \cos \varphi + \vec{n} \times \vec{S} \sin \varphi. \quad (46)$$

Az \vec{S}' vektor \vec{S} -ből a $\vec{\varphi} = \vec{n}\varphi$ forgásvektorú elforgatással áll elő. Ha (1–4)-ben x_1 és x_2 egy tömegpont helyzetvektorának derékszögű komponensei, úgy \vec{S} nem a mi háromdimenziós terünk vektora, melyben élünk. Csak a (10), ill. (36), (41) képletekkel értelmezett S_1, S_2, S_3 mennyiségek (23), (37) által „indukált” transzformációja rendelkezik ugyanolyan matematikai tulajdonságokkal, mint a mi háromdimenziós terünk vektorkomponenseinek forgástranszformációja. Az SU_2 csoport minden egyes $U(\vec{\varphi})$ elemének megfelel \vec{S} három komponensének egy \vec{S} forgásvektorú forgástranszformációja. A talált eredmény az SU_2 kétdimenziós speciális unitér csoport és az R_3 forgáscsoport között fennálló benső kapcsolatot tükröz vissza. Ez egy kettő-egy értelmű művelettartó megfeleltetés létesítésének lehetősége (homomorfia). Az SU_2 csoportnak két olyan eleme van, melyhez a megfeleltetés R_3 ugyanazon elemét rendeli. Így pl. SU_2 $\varphi = 0$, ill. $\varphi = 2\pi$ -vel jellemzett $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, $-E = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ elemeinek egyaránt R_3 azonos transzformációja ($\vec{S}' = \vec{S}$) felel meg.

A kétszeresen összefüggő R_3 -nak az egyszeresen összefüggő SU_2 univerzális fedőcsoportja. Az R_3 és SU_2 csoportok kapcsolatának, mellyel itt találkoztunk, igen fontos szerepe van az elméleti fizika matematikai apparátusában. A kétdimenziós harmonikus oszcillátor csak egy speciális példa; központi szerepet tölt be azonban ez a kapcsolat az $\frac{1}{2}$ spin kvantumelméletében. Itt lényeges szerep jut SU_2 azon ábrázolásainak, amelyek kettő-egy homomorfizmus keretében képezhetők le R_3 -ra. Ezeket szokták R_3 kétértékű ábrázolásainak nevezni.

Vizsgáljuk meg, mi az S_1, S_2, S_3 mennyiségek fent megismert forgástranszformációinak, ill. az α_1, α_2 változók megfelelő unimoduláris unitér transzformációinak szemléletes fizikai jelentése. Vegyük szemügyre rendre a $\vec{\varphi}(\varphi, 0, 0)$, $\vec{\varphi}(0, \varphi, 0)$, $\vec{\varphi}(0, 0, \varphi)$ forgásvektorú transzformációkat. A megfelelő $U(\vec{\varphi})$ mátrixok:

$$U(\varphi 00) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -i \sin \frac{\varphi}{2} \\ -i \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}, \quad (47a)$$

$$U(0\varphi 0) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}, \quad (47b)$$

$$U(00\varphi) = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (47c)$$

Mindenek előtt megjegyezzük, hogy

$$U(\varphi 00) = U\left(00 - \frac{\pi}{2}\right) U(0\varphi 0) U\left(00 \frac{\pi}{2}\right). \quad (48)$$

Elegendő tehát, ha a (47b—c) transzformációkat vizsgáljuk; (47b) és (47c) az

$$\left. \begin{aligned} \alpha'_1 &= \alpha_1 \cos \frac{\varphi}{2} - \alpha_2 \sin \frac{\varphi}{2}, \\ \alpha'_2 &= \alpha_1 \sin \frac{\varphi}{2} + \alpha_2 \cos \frac{\varphi}{2}, \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

ill.

$$\left. \begin{aligned} \alpha'_1 &= e^{-\frac{i}{2}\varphi} \alpha_1, \\ \alpha'_2 &= e^{\frac{i}{2}\varphi} \alpha_2 \end{aligned} \right\} \quad (50)$$

módon transzformálja az α_1, α_2 mennyiségeket. A (49) valós mátrixú transzformáció a koordinátákat, valamint az impulzusokat egyöntetűen transzformálja, $\frac{\varphi}{2}$ szögű elforgatásukat írja le:

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \frac{\varphi}{2} - x_2 \sin \frac{\varphi}{2}, & p'_1 &= p_1 \cos \frac{\varphi}{2} - p_2 \sin \frac{\varphi}{2}, \\ x'_2 &= x_1 \sin \frac{\varphi}{2} + x_2 \cos \frac{\varphi}{2}; & p'_2 &= p_1 \sin \frac{\varphi}{2} + p_2 \cos \frac{\varphi}{2}. \end{aligned} \right\} \quad (49')$$

Ez a transzformáció, mely \vec{S} -et az „y-tengely” körül forgatja el, az impulzusmomentummal arányos $S_2 = \frac{1}{2}\alpha^* \sigma_2 \alpha = \frac{1}{2}(x_1 p_2 - x_2 p_1)$ mennyiséget érintetlenül hagyja, ugyanakkor S_1 és S_3 változást szenved. Az SU_2 elemei, valamint \vec{S} elforgatásai között fennálló megfelelés kettő-egy értelmű jellegének megfelelően \vec{S} egy teljes fordulata (míg a φ szög 0-tól 2π -ig változik) az oszcillátor mozgását nem önmagába, hanem az azonos pályán ellentétes fázissal végbemenő mozgásba viszi át. Ahhoz, hogy az eredeti mozgást kapjuk vissza, \vec{S} -nek kétszer kell körbe fordulnia. — Az (50)

transzformáció az x_1 - és x_2 -tengelymenti mozgások fázisait $\pm \frac{\varphi}{2}$ -vel változtatja meg, a két mozgás között tehát φ fáziskülönbséget eredményez. Feleljenek meg pl. az $x_1 = x_2$ egyenes mentén végbemenő oszcillációnak; ekkor, ha mondjuk $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$,

az α'_1, α'_2 transzformált változók körmozgást írnak le. Most a korrelációt jellemző $S_1 = (p_1 p_2 + m^2 \omega^2 x_1 x_2) / 2m\omega$ és az impulzusmomentummal arányos S_2 szenved változást. [A példában zérus impulzusmomentumú, maximálisan korrelált mozgás olyan mozgásba megy át, melynek impulzusmomentuma adott összenergia (amplitúdó) mellett maximális és melyre S_1 zérus.] Ugyanakkor S_3 , mely az x_1 - és x_2 -tengelymenti oszcillációk energiáinak különbsége, változatlan marad. A (50) transz-

formáció a koordinátákat és az impulzusokat a

$$\left. \begin{aligned} x'_1 &= x_1 \cos \frac{\varphi}{2} + \frac{1}{m\omega} p_1 \sin \frac{\varphi}{2}, & p'_1 &= p_1 \cos \frac{\varphi}{2} - m\omega x_1 \sin \frac{\varphi}{2}, \\ x'_2 &= x_2 \cos \frac{\varphi}{2} - \frac{1}{m\omega} p_2 \sin \frac{\varphi}{2}, & p'_2 &= p_2 \cos \frac{\varphi}{2} + m\omega x_2 \sin \frac{\varphi}{2} \end{aligned} \right\} \quad (50')$$

képletek szerint transzformálja. — Feljegyezzük a koordináták és impulzusok transzformációs képletét tetszőleges $U(\varphi)$ esetére is:

$$\begin{pmatrix} p'_2 \\ p'_1 \\ m\omega x'_1 \\ m\omega x'_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & n_2 \sin \frac{\varphi}{2} & -n_1 \sin \frac{\varphi}{2} & n_3 \sin \frac{\varphi}{2} \\ -n_2 \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} & -n_3 \sin \frac{\varphi}{2} & -n_1 \sin \frac{\varphi}{2} \\ n_1 \sin \frac{\varphi}{2} & n_3 \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} & -n_2 \sin \frac{\varphi}{2} \\ -n_3 \sin \frac{\varphi}{2} & n_1 \sin \frac{\varphi}{2} & n_2 \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_2 \\ p_1 \\ m\omega x_1 \\ m\omega x_2 \end{pmatrix}. \quad (51)$$

Közvetlenül meggyőződhetünk róla, hogy a transzformáció mátrixa szimplektikus. Megjegyzésre érdemes, hogy ugyanakkor ortogonális is, hiszen változatlanul hagyja az (1) energiát. Ezen mátrixok csoportja, mely SU_2 -vel izomorf, közös részét képezi a négydimenziós valós Sp_4 szimplektikus és O'_4 ortogonális csoportoknak.

1b. A síkbeli Kepler-probléma

Induljunk ki Kepler törvényeiből.

I. A naprendszerben az égitestek pályája kúpszelet, melynek egyik gyújtópontjában a Nap áll.

II. A vezérsugar egyenlő idők alatt egyenlő területeket sűrol.

III. A bolygók keringési idejének négyzetei úgy aránylanak egymáshoz, mint ellipszispályájuk nagytengelyének köbei.

A Kepler-törvények alapján csaknem közvetlenül felírható néhány fontos mozgásállandó. Egyik ilyen az

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{p} \quad (1)$$

impulzusmomentum. Ez a területi sebesség $\frac{1}{2}\underline{r} \times \dot{\underline{r}}$ vektorát az égitest m tömegének kétszeresével szorozva adódik, s I–II. értelmében mind irányára, mind nagyságára nézve állandó. Írjuk fel a pályagörbe egyenletét, mely I. szerint kúpszelet:

$$r(\varphi) = \frac{p}{1 - \varepsilon \cos \varphi}. \quad (2)$$

A p paraméter, mint az III.-ból következik, \underline{L}^2 -tel arányos; az arányossági tényezőt

1/cm alakban írjuk:

$$p = \frac{L^2}{cm}. \quad (3)$$

(A dinamika alapegyenleteiből c -re a $\gamma m M$ érték adódik; γ a gravitációs állandó, M a naptömeg.) Vezessük be a numerikus excentricitás vektorát a következő definícióval. Legyen $\underline{\varepsilon}$ a Nap által elfoglalt gyújtópontból a perihélium felé mutató vektorral ellentétes irányú vektor, s hossza legyen egyenlő a numerikus excentricitással: $|\underline{\varepsilon}| = \varepsilon$. Felhasználva az (1), (3) képleteket, a (2) pályaeqyenletnek egyszerű vektoralgebrai átalakítással az

$$\underline{r} \left(\frac{r}{r} - \underline{\varepsilon} \right) = \underline{r} \frac{p \times \underline{L}}{cm} \quad (r = |\underline{r}|) \quad (4)$$

alak adható. Kézenfekvő feltenni a kérdést: fennáll-e az

$$\underline{\varepsilon} = \frac{r}{r} - \frac{p \times \underline{L}}{cm} \quad (5)$$

egyenlőség? Ha igen, a jobb oldal a probléma újabb mozgásállandója. Természetesen az (5) egyenlőség fennállása (4)-ből nem következhetik. Mindazonáltal (5) fennáll. Erről \underline{r} és \underline{p} közvetlen behelyettesítésével győződünk meg. A helyzetvektor, valamint az annak irányába mutató egységvektor:

$$\underline{r} \begin{cases} x = r \cos \varphi, \\ y = r \sin \varphi; \end{cases} \quad (6)$$

$$\frac{\underline{r}}{r} \begin{cases} \cos \varphi, \\ \sin \varphi. \end{cases} \quad (7)$$

Differenciáljuk a (2) egyenletet φ szerint:

$$\frac{dr}{d\varphi} = -\frac{p\varepsilon \sin \varphi}{(1 - \varepsilon \cos \varphi)^2} = -\frac{\varepsilon}{p} r^2 \sin \varphi. \quad (8)$$

Az $L = |\underline{L}|$ jelöléssel írható:

$$\dot{\varphi} = \frac{L}{mr^2}. \quad (9)$$

Differenciáljuk (6)-ot φ szerint (8) figyelembevételével mellett:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx}{d\varphi} &= \frac{dr}{d\varphi} \cos \varphi - r \sin \varphi = -\frac{\varepsilon}{p} r^2 \sin \varphi \cos \varphi - r \sin \varphi = -\frac{1}{p} r^2 \sin \varphi, \\ \frac{dy}{d\varphi} &= \frac{dr}{d\varphi} \sin \varphi + r \cos \varphi = -\frac{\varepsilon}{p} r^2 \sin^2 \varphi + r \cos \varphi = \frac{1}{p} r^2 (\cos \varphi - \varepsilon). \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

A (9), (10) képleteket felhasználva és (3)-at is figyelembe véve írható:

$$\underline{p} \begin{cases} m\dot{x} = m \frac{dx}{d\varphi} \dot{\varphi} = -\frac{cm}{L} \sin \varphi, \\ m\dot{y} = m \frac{dy}{d\varphi} \dot{\varphi} = \frac{cm}{L} (\cos \varphi - \varepsilon). \end{cases} \quad (11)$$

Az (5)-ben szereplő vektorszorzatra kapjuk:

$$\underline{p} \times \underline{L} = \frac{cm}{L} \begin{vmatrix} \underline{i} & \underline{j} & \underline{k} \\ -\sin \varphi & (\cos \varphi - \varepsilon) & 0 \\ 0 & 0 & L \end{vmatrix} \begin{Bmatrix} cm(\cos \varphi - \varepsilon) \\ cm \sin \varphi \end{Bmatrix} \quad (12)$$

[A (12) képletben $\underline{i}, \underline{j}, \underline{k}$ a szokott módon rendre az x -, y -, z -tengelyek irányába mutató egységvektorokat jelentik. A z -tengelyt a pályasíkra merőleges impulzusmomentum irányában vettük fel. A pályasíokban fekvő vektorok zérussal egyenlő z -komponensét nem írjuk ki. Így tettünk a (6), (7), (11), (12) képletekben.] Felhasználva (7)-et és (12)-t, a behelyettesítés az (5) jobb oldalán álló vektor x -, y -komponenseire az $\varepsilon, 0$ értékeket adja. Az (5) egyenlőséget ezzel igazoltuk. Az (5) mozgásállandót nevezik Laplace-integrálnak, de összekapcsolják a Lenz, Runge, Pauli nevekkkel is.

A mozgásállandók között fontos helyet foglal el az energia. Ennek kifejezése a Kepler-probléma esetében

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{c}{r}. \quad (13)$$

Helyettesítsük be ide (11)-et, és (3) figyelembevételével (2)-t. Kapjuk:

$$\begin{aligned} E &= \frac{c^2 m}{2L^2} [\sin^2 \varphi + \cos^2 \varphi - 2\varepsilon \cos \varphi + \varepsilon^2 - 2(1 - \varepsilon \cos \varphi)] = \\ &= \frac{c^2 m}{2L^2} (\varepsilon^2 - 1). \end{aligned} \quad (14)$$

Az E energia eszerint kifejezhető a két korábban tárgyalt mozgásállandóval, az \underline{L} impulzusmomentum-vektorral és az $\underline{\varepsilon}$ Laplace-integrállal. Vezessük be most — Hulthén és Bargmann nyomán — az

$$\underline{A} = c \left(\frac{m}{2|E|} \right)^{\frac{1}{2}} \underline{\varepsilon} \quad (15)$$

vektort. Szimmetrikusabb kifejezést nyerünk E számára, ha azt \underline{L} és $\underline{\varepsilon}$ helyett \underline{L} és \underline{A} segítségével állítjuk elő. Meg kell különböztetnünk az $E \leq 0$ eseteket. Az $\underline{\varepsilon}$ Laplace-integrált (15)-ből kifejezve és (14)-be helyettesítve az energiára az

$$E = \mp \frac{c^2 m}{2(\underline{A}^2 \pm \underline{L}^2)} \quad (16)$$

kifejezés nyerhető. Itt $E < 0$ esetén a felső, $E > 0$ esetén az alsó előjelet kell venni.

Szorítkozzunk a síkbeli Kepler-problémára. Ez azt jelenti, hogy csak olyan pályákra terjesztjük ki figyelmünket, amelyek az adott xy -síkban foglalnak helyet. Ekkor \underline{A} -t két komponens: A_1, A_2 , \underline{L} -et pedig egyetlen komponense: $L_3 = L$, jellemzi. Legyen

$$F_1 = A_2, \quad F_2 = -A_1, \quad F_3 = L. \quad (17)$$

Ezen három mennyiség összefoglaló jelölésére az \vec{F} szimbólumot fogjuk alkalmazni. Legyen \vec{F}^2 jelentése

$$\vec{F}^2 = F_1^2 + F_2^2 + F_3^2. \quad (18)$$

Itt és az alább következőkben kettős előjel esetén, mint (16) alatt is, $E < 0$ mellett a felső, $E > 0$ mellett az alsó előjel veendő. Az energia (16) kifejezése most az

$$E = \mp \frac{c^2 m}{2 \vec{F}^2} \quad (19)$$

alakba írható.

Valamely Kepler-pályát síkjában elforgatva újabb Kepler-pályát nyerünk. A transzformáció változatlanul hagyja az E energiát. Ez a mozgástörvények és a Hamilton-függvény alapvető, a tér izotrópiájával összefüggő szimmetriáját tükrözi vissza. A pálya síkjában végrehajtott elforgatás azonban nem a legáltalánosabb, a Kepler-mozgásra alkalmazható transzformáció, mely változatlanul hagyja az energiát. (Még a síkbeli Kepler-probléma esetében sem, melyre most szorítkozzunk.) Ezen elforgatásokkal szemben $F_1^2 + F_2^2 = A^2$ és $F_3^2 = L^2$ külön-külön invariáns, holott a (19) energiakifejezés invarianciájához ez nem szükséges: elegendő, ha \vec{F}^2 marad változatlan. A keresett általánosabb transzformációk adódnak, ha az F_1, F_2, F_3 mozgásállandókat olyan valós együtthatójú lineáris transzformációknak vetjük alá, amelyekkel szemben azt a követelményt támasztjuk, hogy \vec{F}^2 legyen invariáns. Ennek a követelménynek az $E < 0$ esetben az O'_3 valós ortogonális csoport, ha pedig $E > 0$, az L'_3 valós Lorentz-csoport transzformációi tesznek eleget.

Tanulságos ezen transzformációkat részletesebben diszkutálni. Változatlanul hagyják ezen transzformációk az energiával együtt $\epsilon^2 - 1$ előjelét, a kúpszelet-pálya a nagytengelyét, a sebesség értékét az ellipszispályák kistengelyének végpontjaiban és a hiperbolapályák végtelen távoli pontjaiban, valamint az ellipszispályák esetében a keringési időt. Változást szenvednek általában: a pályagörbe p paramétere és a vele (3) szerint összefüggő L impulzusmomentum, az ϵ numerikus és az $e = \epsilon a$ lineáris excentricitás, valamint az \underline{A} vektor, melynek hosszát (15) szerint ϵ határozza meg, a b kistengely, a perihélium és — az ellipszispályák esetében — az aphélium távolsága, a maximális és a minimális sebesség.

A pálya, valamint a hodográf egyenletének olyan alak adható, mely szembe-
szökően kifejezésre juttatja az O'_3 , ill. L'_3 csoporttal szemben mutatott szimmetriát. Képezzük ebből a célból az $\underline{A} \times \underline{p}$ és $\underline{A} \times \underline{r}$ vektorszorzatokat. Bevezetve a

$$p_0 = (2m |E|)^{\frac{1}{2}} \quad (20)$$

jelölést, (1), (5), (13), (15) felhasználásával írható:

$$\begin{aligned} \underline{A} \times \underline{p} &= \frac{mc}{p_0} \left(\frac{\underline{L}}{r} - \frac{(\underline{p} \times \underline{L}) \times \underline{p}}{cm} \right) = \\ &= \frac{m}{p_0} \underline{L} \left(\frac{c}{r} - \frac{p^2}{m} \right) = \underline{L} \frac{\pm p_0^2 - p^2}{2p_0}. \end{aligned} \quad (21)$$

Tekintetbe véve, hogy (14–15) szerint $|A|/|L| = \varepsilon/\sqrt{\pm(1-\varepsilon^2)}$, és (2) szerint $r\varepsilon \cos \varphi = r-p$, továbbá, hogy $a = \pm p/(1-\varepsilon^2)$ és $e = \varepsilon a$, az $A \times r$ vektorszorzatra kapjuk:

$$\begin{aligned} A \times r &= \frac{L}{|L|} |A| r \sin \varphi = L \frac{\varepsilon r \sin \varphi}{\sqrt{\pm(1-\varepsilon^2)}} = L \sqrt{\frac{\varepsilon^2 r^2 (1 - \cos^2 \varphi)}{\pm(1-\varepsilon^2)}} \\ &= L \sqrt{\frac{\varepsilon^2 r^2 - (r-p)^2}{\pm(1-\varepsilon^2)}} = L \sqrt{\pm[a^2 - (r \mp e)^2]}. \end{aligned} \quad (22)$$

Vezessük be a lineáris excentricitás e vektorát: $\underline{e} = a\varepsilon$. Fennáll: $\underline{r}e = r\varepsilon \cos \varphi$; figyelembe vesszük ezen kívül, hogy $A \times \underline{e} = 0$. Eszerint (22) helyett írható:

$$A \times (r \mp e) = L \sqrt{\pm[a^2 - (r \mp e)^2]}. \quad (23)$$

A (21), valamint a (22), ill. (23) vektoregyenletnek egyedül z -komponense nem zérus. Kiírva ezt az el nem tűnő komponenset, (21) a hodográf-kör, (23) pedig a pályaellipszis, ill. hiperbola egyenletét adja. Megjegyezzük, hogy (23) alatt $r \mp e$ a kúpszetet centrumát a fútóponttal összekötő vektor; (23)-ból tehát közvetlenül megkapható a kúpszelet-pálya egyenletének a főtengelyekre transzformált alakja.

Fent láttuk: valamely Kepler-pálya $\vec{F}(F_1, F_2, F_3)$ mozgásállandóira az O'_3 , ill. L'_3 csoport transzformációit alkalmazva azonos energiájú (izoerg) Kepler-pálya $\vec{F}'(F'_1, F'_2, F'_3)$ mozgásállandóit kapjuk. Ily módon két izoerg pálya mint egész között létesíthetünk megfeleltetést. Megfogalmazható azonban ez a megfeleltetés részletesebben, pontról pontra, a pályára s a hodografra nézve egyaránt.

Legyen $\vec{\pi}(\pi_1, \pi_2, \pi_3)$, ahol

$$\pi_1 = \frac{2p_0^2}{p^2 \pm p_0^2} p_1, \quad \pi_2 = \frac{2p_0^2}{p^2 \pm p_0^2} p_2, \quad \pi_3 = \frac{\pm p^2 + p_0^2}{p^2 \pm p_0^2}, \quad (24)$$

továbbá $\vec{q}(\varrho_1, \varrho_2, \varrho_3)$, ahol

$$\varrho_1 = x \mp e_1, \quad \varrho_2 = y \mp e_2, \quad \varrho_3 = \sqrt{\pm[a^2 - (r \mp e)^2]}. \quad (25)$$

Fennáll:

$$\vec{\pi}^2 \equiv \pi_1^2 + \pi_2^2 \pm \pi_3^2 = \pm p_0^2, \quad (26)$$

$$\vec{q}^2 \equiv \varrho_1^2 + \varrho_2^2 \pm \varrho_3^2 = a^2. \quad (27)$$

A (24), (25) jelöléseket felhasználva a hodográf (21) s a pálya (23) egyenlete az

$$\vec{F} \vec{\pi} \equiv F_1 \pi_1 + F_2 \pi_2 \pm F_3 \pi_3 = 0, \quad (28)$$

ill. az

$$\vec{F} \vec{q} \equiv F_1 \varrho_1 + F_2 \varrho_2 \pm F_3 \varrho_3 = 0 \quad (29)$$

alakba írható. Itt megjegyezzük, hogy a (22), (23) és (25) képletekben szereplő négyzetgyökök előjelét a (22–23) bal oldalán álló vektorszorzat el nem tűnő komponensének előjele határozza meg.

A pálya s a hodográf egyenletének (29), ill. (28) alakja szembeszökően mutatja az O'_3 , ill. L'_3 csoporttal szemben mutatott szimmetriát. Ennek alapján megadható a leképezés, mely az \vec{F} jellemezte pálya és hodográf minden egyes pontjának megfelelteti az \vec{F}' -höz tartozó pálya, ill. hodográf egy-egy pontját. Alkalmazzuk \vec{F}

mellett \vec{q} -ra és $\vec{\pi}$ -re is az O'_3 , ill. L'_3 csoport valamely transzformációját. A skalár-szorzat invarianciája folytán a nyert \vec{F}' , \vec{q}' , $\vec{\pi}'$ ugyancsak eleget tesz a (28—29) egyenleteknek: $\vec{F}'\vec{q}'=0$, $\vec{F}'\vec{\pi}'=0$. A $\vec{q} \rightarrow \vec{q}'$, $\vec{\pi} \rightarrow \vec{\pi}'$ megfeleltetés az \vec{F} jellemezte pályát és hodográfot az \vec{F}' jellemezte pályára, ill. hodográfra képezi le.

A nyert összefüggéseknek szemléletes geometriai értelmezés adható. Foglalkozunk az $E < 0$ esettel. A (27) összefüggés szerint \vec{q} a kezdőpont köré írt a sugarú gömb felületén változhat. A (29) képlet \vec{q} változását az \vec{F} normálisú s a kezdőponton áthaladó síkkal a gömbből kimetszett főkör kerületére korlátozza. Hasonlóképpen (26) értelmében $\vec{\pi}$ a kezdőpont köré írt p_0 sugarú gömbfelületen változhat, és változását (28) a kezdőponton átfektetett, \vec{F} normálisú sík kimetszette főkörre korlátozza.

Fennáll:

$$\vec{q} = \frac{1}{p_0^2} \vec{\pi} \times \vec{F}, \quad (30)$$

$$\vec{\pi} = -\frac{1}{a^2} \vec{q} \times \vec{F}. \quad (31)$$

Valóban, (5), (11), (13), (14), (15), (20), (22), (23), valamint az E , p_0 és a között fennálló

$$|E| = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{c}{2a} \quad (32)$$

összefüggés figyelembevételével kapjuk:

$$\frac{2}{p^2 + p_0^2} p \times L - \frac{p^2 - p_0^2}{p_0(p^2 + p_0^2)} A = r - e, \quad (33)$$

$$-\frac{2}{p^2 + p_0^2} p A = \sqrt{a^2 - (r - e)^2}, \quad (34)$$

amivel (30) fennállását igazoltuk. A (16), (21), (32), (33), (34) képletek felhasználásával kapjuk továbbá:

$$-\frac{1}{a^2} [(r - e) \times L + \sqrt{a^2 - (r - e)^2} A] = \frac{2p_0^2}{p^2 + p_0^2} p, \quad (35)$$

$$\frac{1}{a^2} (r - e) A = -\frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2} p_0, \quad (36)$$

amivel (31) fennállását is igazoltuk. A (30), (31) összefüggésekből következik:

$$\vec{\pi} \vec{q} = 0, \quad (37)$$

$$\vec{F} = \vec{q} \times \vec{\pi}. \quad (38)$$

A nyert eredmények a következő kinematikai értelmezést teszik lehetővé. Jelentse \vec{q} egy m tömegű tömegpont helyzetvektorát. Végezzon a tömegpont tehetetlenségi mozgást az a sugarú gömb felületén az \vec{F} normálisú síkkal kimetszett főkörön.

Legyen a tömegpont impulzusa $\vec{\pi}$; ennek nagysága (26) szerint az állandó p_0 érték, és a (37) szerint merőleges \vec{q} -ra. Mint (38) mutatja, az impulzusmomentumot \vec{F} adja. A tömegpont $\mathcal{E} = p_0^2/2m$ energiája (32) szerint a Kepler-mozgás energiájának abszolútértékével egyenlő. Kifejezve \mathcal{E} -t az impulzusmomentummal és (32)-t figyelembe véve, (19)-cel összhangban kapjuk:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2ma^2} \vec{F}^2 = \frac{c^2 m}{2\vec{F}^2}. \quad (39)$$

A kapott eredmény szokatlan: az energia az impulzusmomentum négyzetével fordítva arányosnak adódott. Ennek az a sugár energiafüggése az oka; a -t az \mathcal{E} energiával fordítva arányosnak választottuk.

A gömbön végbemenő tehetetlenségi mozgás kapcsolata a Kepler-mozgással a következő. Az a sugarú gömbből az \vec{F} normálisú síkkal kimetszett főkört a q_1, q_2 síkra párhuzamosan projiciálva, mint az a (25) s a (23), (29) képletekből következik, megkapjuk az \vec{F} jellemezte Kepler-ellipszist; q_1, q_2 jelentése: az ellipszis futópontjának koordinátái a főtengelyrendszerben. A megfelelő hodográfot (24) és (21), (28) szerint oly módon kapjuk meg, hogy a $\vec{\pi}$ vektor által a p_0 sugarú gömbön leírt, s ugyancsak az \vec{F} normálisú síkban fekvő főkört a p_1, p_2 síkra sztereografikusan projiciáljuk. Miközben az \vec{F} háromdimenziós vektor minden térirányt befut, az adott energiához tartozó izoerg sereg valamennyi Kepler-ellipszise, ill. hodográfja kiadódik.

Hasonló geometriai, ill. kinematikai megfontolások fűzhetők az $E > 0$ esetben nyert képletekhez.

1c. A térbeli Kepler-probléma

A Kepler-pályák természetesen háromdimenziós térünkben is síkgörbék. Ez a mozgás centrális jellegéből következik. Térbeli Kepler-problémáról azért beszélünk, hogy kifejezésre juttassuk: a pályasík orientációja a térben tetszőleges lehet. A térbeli Kepler-problémának — a mozgásegyenleteknek és az energiának — mindenek előtt szimmetriacsoportja a (Nap centrumán áthaladó tengely körül végrehajtott) térbeli elforgatások csoportja, a háromdimenziós forgáscsoport. Valamely Kepler-pályát tetszőleges módon elforgatva azonos energiájú Kepler-pályát nyerünk. Ez az (1b. 13), (1b. 15), (1b. 16) képletek bármelyikéből látható: mindenütt vektorok négyzete vagy abszolút értéke szerepel, ami elforgatással szemben invariáns. A háromdimenziós forgáscsoporttal szemben mutatott ezen szimmetria a tér izotrópiájával függ össze. A Kepler-pálya elforgatása — hasonlóan a síkbeli esetben látottakhoz, nem a mozgás legáltalánosabb olyan transzformációja, amely változatlanul hagyja az energiát. A térbeli elforgatásokkal szemben az energia (1b. 16) kifejezésében szereplő \underline{L}^2 és \underline{A}^2 külön-külön invariáns, holott az energiakifejezés invarianciájához ez nem szükséges. Elegendő, ha $\underline{L}^2 \pm \underline{A}^2$ marad változatlan. Első pillantásra így vélhetnénk, hogy a keresett transzformációk pl. az $E < 0$ esetben az $\underline{L}, \underline{A}$ vektorok $L_1, L_2, L_3, A_1, A_2, A_3$ komponenseinek mindazon transzformációi, amelyekkel szemben $\underline{L}^2 + \underline{A}^2$ invariáns. Ezek hatdimenziós ortogonális transzformációk lennének. Van azonban az $\underline{L}^2 + \underline{A}^2$ kifejezés — ill. az $E > 0$ esetben az $\underline{L}^2 - \underline{A}^2$ kifejezés — invarianciája mellett egy további feltétel, melyet a keresett transzformációknak teljesíteniük kell. Az \underline{A} vektor a pálya síkjában fekszik, az \underline{L} impulzusmomen-

tum pedig merőleges arra. Fennáll tehát:

$$\underline{L} \underline{A} = 0 \quad (1)$$

Ahhoz, hogy a transzformáció szolgáltatta \underline{L}' és \underline{A}' is Kepler-mozgást jellemezzen, szükséges, hogy ezek is merőleges vektorpárt alkossanak: $\underline{L}' \underline{A}' = 0$. A keresett transzformációknak eszerint az (1b. 16) energiakifejezés mellett az (1) feltételt is változatlanul kell hagyniok. Ilyen transzformációkhoz a következőképpen juthatunk.

Foglalkozunk négy változó: $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ ortogonális transzformációival. Ezen változóknak jelenleg semmilyen geometriai vagy fizikai jelentést nem tulajdonítunk. A

$$\xi'_\alpha = a_{\alpha\beta} \xi_\beta \quad (\alpha = 1, 2, 3, 4) \quad (2)$$

lineáris transzformációt ortogonálisnak nevezzük, ha

$$\xi'_\alpha \xi'_\alpha = \xi_\alpha \xi_\alpha \quad (3)$$

teljesül. Itt és a következőkben a kétszer fellépő görög indexekre egytől négyig összegezni kell. A (3) követelményből az együttthatókra az

$$a_{\alpha\beta} a_{\alpha\gamma} = \delta_{\beta\gamma} \quad (4)$$

feltételt nyerjük. Nevezzük a (2) transzformációnak alávetett $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ változókat egy négydimenziós vektor komponenseinek. A ξ_α, η_β négydimenziós vektor-komponensek $T_{\alpha\beta} = \xi_\alpha \eta_\beta$ szorzataira (4) felhasználásával a

$$T'_{\alpha\beta} = a_{\alpha\gamma} a_{\beta\delta} T_{\gamma\delta} \quad (5)$$

transzformációs képletet nyerjük. Az (5) transzformációnak alávetett $T_{\alpha\beta}$ mennyiségeket egy négydimenziós tenzor komponenseinek mondjuk. Egy antiszimmetrikus tenzor $F_{\alpha\beta}$ komponenseire $F_{\alpha\beta} = -F_{\beta\alpha}$ teljesül. Egy négydimenziós antiszimmetrikus tenzor független komponenseinek száma $\binom{4}{2} = 6$.

Foglaljuk be egy négydimenziós antiszimmetrikus tenzorba a Kepler-mozgás $\underline{L}(L_1, L_2, L_3), \underline{A}(A_1, A_2, A_3)$ mozgásállandóit a következő módon. Legyen $F_{12} = L_3, F_{23} = L_1, F_{31} = L_2, F_{14} = A_1, F_{24} = A_2, F_{34} = A_3$. Az $F_{\alpha\beta}$ elemeket a szokott módon (α a sor, β az oszlop indexe) négyzetes skémába elrendezve írható:

$$(F_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & L_3 & -L_2 & A_1 \\ -L_3 & 0 & L_1 & A_2 \\ L_2 & -L_1 & 0 & A_3 \\ -A_1 & -A_2 & -A_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Meg kell követelnünk, hogy a (6) tenzor valós $F_{12} = L_3, \dots, F_{14} = A_1, \dots$ komponenseire az (5) transzformációt alkalmazva valós $F'_{12} = L'_3, \dots, F'_{14} = A'_1, \dots$ transzformált komponensek adódjanak. Ez a követelmény teljesül, ha (2) alatt valamennyi $a_{\alpha\beta}$ együtttható valós. Ekkor valós $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ mellett $\xi'_1, \xi'_2, \xi'_3, \xi'_4$ is valós, és az (5) transzformációk neve: valós négydimenziós ortogonális transzformáció. Az általuk alkotott csoport az O'_4 valós ortogonális csoport. A (4–5) képletek segítségével

kapjuk: $F'_{\alpha\beta} F'_{\alpha\beta} = F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}$, azaz

$$\underline{L}'^2 + \underline{A}'^2 = \underline{L}^2 + \underline{A}^2. \quad (7)$$

Az $\underline{L}^2 + \underline{A}^2$ kifejezés szerint a (6) négydimenziós antiszimmetrikus tenzor (2—5) valós ortogonális transzformációival szemben invariáns.

Legyen most

$$(G_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & L_3 & -L_2 & iA_1 \\ -L_3 & 0 & L_1 & iA_2 \\ L_2 & -L_1 & 0 & iA_3 \\ -iA_1 & -iA_2 & -iA_3 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Ha (2) alatt $a_{\alpha\beta}$ az $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, valamint az $\alpha = \beta = 4$ esetben valós, az $\alpha = 1, 2, 3$, $\beta = 4$ és $\beta = 1, 2, 3$, $\alpha = 4$ esetekben pedig képzetes, úgy valós $G_{12} = L_3, \dots, \frac{1}{i} G_{14} = A_1, \dots$ mellett $G'_{12} = L'_3, \dots, \frac{1}{i} G'_{14} = A'_1, \dots$ ugyancsak valós. Most valós mellett ξ'_α általában nem az ($\alpha = 1, 2, 3, 4$), ha azonban $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \frac{1}{i} \xi_4 = \xi_0$ valós, a (2) transzformáció valós $\xi'_1, \xi'_2, \xi'_3, \frac{1}{i} \xi'_4 = \xi'_0$ értékekre vezet. Ezen valós változókra (3) értelmében

$$\xi_1'^2 + \xi_2'^2 + \xi_3'^2 - \xi_0'^2 = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 - \xi_0^2 \quad (9)$$

teljesül. Ilyenkor a (2) transzformációk neve: valós négydimenziós Lorentz-transzformáció. Ezek alkotják az L'_4 valós Lorentz-csoportot. Fennáll: $G'_{\alpha\beta} G'_{\alpha\beta} = G_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}$, azaz

$$\underline{L}'^2 - \underline{A}'^2 = \underline{L}^2 - \underline{A}^2. \quad (10)$$

Az $\underline{L}^2 - \underline{A}^2$ kifejezés eszerint a (8) négydimenziós antiszimmetrikus tenzor (2—5) valós Lorentz-transzformációival invariáns.

Vezessük be most az $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ Levi—Civita szimbólumot, mely minden index-párban antiszimmetrikus és $\varepsilon_{1234} = 1$. Fennáll:

$$a_{\alpha\pi} a_{\beta\zeta} a_{\gamma\sigma} a_{\delta\tau} \varepsilon_{\pi\sigma\tau} = \det(a_{\mu\nu}) \cdot \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}. \quad (11)$$

Írható:

$$\frac{1}{8} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} F_{\alpha\beta} F_{\gamma\delta} = \frac{1}{8i} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} G_{\alpha\beta} G_{\gamma\delta} = \underline{L} \underline{A}. \quad (12)$$

Következik:

$$\underline{L}' \underline{A}' = \det(a_{\mu\nu}) \cdot \underline{L} \underline{A}. \quad (13)$$

Látható: ha $\underline{L} \underline{A}$ zérus, $\underline{L}' \underline{A}'$ is eltűnik.

Eszerint az $E < 0$, esetben a (6) antiszimmetrikus tenzor valós ortogonális transzformációi mind az (1b. 16) energiát, mind pedig az (1) feltételt változtlanul hagyják. Az $E > 0$ esetben az O'_4 csoport valós ortogonális transzformációinak szerepét a L'_4 csoport Lorentz-transzformációi veszik át, és a (8) tenzorról tehetők hasonló megállapítások.

A talált transzformációk általánosabbak, mint a térbeli elforgatás. A térbeli elforgatások alkotta R_3 forgáscsoport elemei, az \underline{L} , \underline{A} háromdimenziós vektorok forgásttranszformációi az $a_{\alpha 4} = a_{4\beta} = 0$, $\det(a_{\alpha\beta}) = 1$, $a_{44} = 1$ specializálással nyerhetők. Az R_3 forgáscsoport eszerint O'_4 -nek és L'_4 -nek alcsoportja.

A Kepler-pálya és a megfelelő hodográf egyenletét most is felírhatjuk „szembe-
szökően kovariáns alakban”, mely közvetlenül láthatóvá teszi a Kepler-problémának az O'_4 , ill. L'_4 csoporttal szemben mutatott szimmetriáját. Az alábbiakban $E < 0$ (vagyis az O'_4 csoport) esetével foglalkozunk részletesen. Az $E > 0$ eset hasonló módon tárgyalható.

A mozgás az időben állandó \underline{L} impulzusmomentum-vektorra merőleges síkban megy végbe. Írható:

$$\underline{L}p = 0 \quad (14)$$

és $\underline{L}r = 0$ vagy

$$\underline{L}(r - e) = 0. \quad (15)$$

Vezessük be — az (1b. 24—25) mintát követve — a

$$\pi_1 = \frac{2p_0^2}{p^2 + p_0^2} p_1, \quad \pi_2 = \frac{2p_0^2}{p^2 + p_0^2} p_2, \quad \pi_3 = \frac{2p_0^2}{p^2 + p_0^2} p_3, \quad \pi_4 = -\frac{p^2 - p_0^2}{p^2 + p_0^2}, \quad (16)$$

$$q_1 = x_1 - e_1, \quad q_2 = x_2 - e_2, \quad q_3 = x_3 - e_3, \quad q_4 = \sqrt{a^2 - (r - e)^2} \quad (17)$$

négydimenziós vektorokat. Ezekre, hasonlóan (1b. 26—27)-hez fennáll:

$$\pi_\alpha \pi_\alpha = p_0^2, \quad (18)$$

$$q_\alpha q_\alpha = a^2. \quad (19)$$

A (16—17) négyesvektorok felhasználásával a (14) és (1b. 21) egyenletek az

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} F_{\beta\gamma} \pi_\delta = 0, \quad (20)$$

a (15) és (1b. 23) egyenletek pedig az

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} F_{\beta\gamma} q_\delta = 0 \quad (21)$$

alakban foglalhatók össze.

A (21), ill. (15), (1b. 23) egyenletek a pályagörbét határozzák meg. A (15) feltevél a pálya síkját jelöli ki; az (1b. 23) egyenlet két oldalán a pálya síkjára merőleges, időben állandó irányú vektor áll, melyeket négyzetre emelve a Kepler-ellipszis egyenletét kapjuk.

A (20), ill. (14), (1b. 21) összefüggések a hodográf egyenletét foglalják magukban. A (14) feltétel szerint p végpontja síkgörbét ír le; az (1b. 21) egyenlet két oldalán az időben állandó \underline{L} impulzusmomentum-vektorral párhuzamos vektor áll, s az egyenlet \underline{L} -l skalárisan beszorozva a hodográf egyenletét nyerjük.

Az (1b. 33—34) és (1b. 35—36) egyenletek — analógiáiban (1b. 30—31)-gyel — most a

$$q_\alpha = \frac{1}{p_0^2} F_{\alpha\beta} \pi_\beta, \quad (22)$$

ill. a

$$\pi_\alpha = -\frac{1}{a^2} F_{\alpha\beta} q_\beta \quad (23)$$

alakban foglalhatók össze. Innen következik:

$$\pi_\alpha \varrho_\alpha = 0, \quad (24)$$

és

$$F_{\alpha\beta} = \varrho_\alpha \pi_\beta - \varrho_\beta \pi_\alpha. \quad (25)$$

A kapott összefüggéseknek — ismét analógiában az előző szakasz megfontolásáival — a következő geometriai-kinematikai értelmezés adható. Tekintsük ϱ_α -t egy tömegpont helyzetvektorának a négydimenziós térben. Mint (19)-ből látható, ϱ_α a kezdőpont köré írt a sugarú hipergömb felületén változhat. A (21)-ben összefoglalt (1b. 23) és (15) egyenletek egy-egy a kezdőpontot magában foglaló háromdimenziós alteret határoznak meg a négydimenziós térben. Ezen két alter egy a kezdőponton áthaladó síkban metszi egymást. A ϱ_α vektor változása az a sugarú négydimenziós hipergömbből ezen sík által kimetszett legnagyobb kör kerülete mentén változhat. A Kepler-pálya futópontjának és a pályaellipszis középpontjának relatív koordinátáit a négydimenziós tér $\varrho_1, \varrho_2, \varrho_3$ háromdimenziós alterére való párhuzamos projekcióval nyerjük. A π_α négyesvektor változását (18) egy a kezdőpont köré írt p_0 sugarú hipergömbre, (20) pedig ennek egy legnagyobb körére korlátozza; ezen legnagyobb kör a ϱ_α leírta körrel egy síkban fekszik. A hodográfot a π_α által leírt körből (16) szerint a $p_1 p_2 p_3$ háromdimenziós impulzustérre való sztereografikus projekcióval nyerjük.

Vegyük tekintetbe, hogy π_α (18) szerint állandó nagyságú vektor, továbbá, hogy (24) szerint ϱ_α és π_α egymásra merőleges. Ezek alapján π_α felfogható mint az a sugarú négydimenziós hipergömbön tehetetlenségi mozgást végző, ϱ_α helyzetvektorú tömegpont impulzusa. A tömegpont $\mathcal{E} = p_0^2/2m$ kinetikus energiája (1b. 32) szerint a Kepler-mozgás energiájának abszolútértékével egyenlő: $\mathcal{E} = |E|$. Analógiában (1b. 39)-cel és megegyezésben (1b. 16)-tal kapjuk:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2ma^2} \frac{F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}}{2} = \frac{c^2 m}{F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}}. \quad (26)$$

Itt jegyezzük meg, hogy a kényszerfeltétel energiafüggése (az a sugar fordítva arányos az energiával: $a = c/2\mathcal{E}$) folytán a négydimenziós egységömbön végzett tehetetlenségi mozgás Hamilton-függvénye nem egyezik meg az \mathcal{E} energiakifejezéssel, hanem annak (-1) -szerese, s így egyenlő a Kepler-probléma Hamilton-függvényével (mely természetesen egyenlő a Kepler-mozgás energiájával). Valóban, a

$$\mathcal{H} = -\mathcal{E} = -\frac{c^2 m}{F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}} \quad (27)$$

Hamilton-függvényből [\mathcal{E} (26) kifejezései közül a másodikat használjuk, melyben csupa „igazi”, energiától független állandó szerepel] leszarmaztatott

$$\dot{\varrho}_\alpha = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_\alpha}, \quad \dot{\pi}_\alpha = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \varrho_\alpha} \quad (28)$$

kanonikus egyenletek (22), (23), (25), valamint (1b. 32) felhasználásával az a sugarú hipergömb egy legnagyobb körén végzett tehetetlenségi mozgás

$$\dot{\varrho}_\alpha = \frac{1}{m} \pi_\alpha, \quad \dot{\pi}_\alpha = -\frac{p_0^2}{ma} \frac{\varrho_\alpha}{a} \quad (29)$$

mozgásegyenleteire vezetnek.

1d. Az n -dimenziós izotróp harmonikus oszcillátor

Az n -dimenziós izotróp harmonikus oszcillátor szimmetriatranszformációi az 1a. szakaszban vizsgált két dimenziós esettel analóg módon tárgyalhatók. Az

$$\alpha_k = \sqrt{\frac{m\omega}{2}} \left(x_k + \frac{i}{m\omega} p_k \right) \quad (k = 1, 2, \dots, n) \quad (1)$$

komplex változókból a

$$H = \omega \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \alpha_i \equiv \omega \underline{\alpha}^* \underline{\alpha} \quad (2)$$

képlet szerint felépülő Hamilton-függvény, az (1) változókra érvényes

$$\dot{\alpha}_k = -i\omega \alpha_k \quad (3)$$

mozgásegyenletekkel (vagy ezen egyenletek kanonikus alakjával) együtt, invariáns az $n \times n$ -es U unitér mátrixok alkotta U_n csoport

$$\underline{\alpha}' = U \underline{\alpha} \quad (4)$$

transzformációival szemben. Itt bevezettük az $\underline{\alpha}'$, ill. $\underline{\alpha}$ n -dimenziós vektort: $\underline{\alpha} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}$.

Az $\alpha_i^* \alpha_j$ mozgásállandók száma n^2 . Ezeknek egy lineáris kombinációjuk az $\underline{\alpha}^* \underline{\alpha}$ -val arányos (2) energia. A fennmaradó $n^2 - 1$ független kombináció az

$$S_{ij} = \alpha_i^* \alpha_j - \frac{\delta_{ij}}{n} \underline{\alpha}^* \underline{\alpha} \quad (5)$$

komponensekkel rendelkező spurtalan n -edrendű tenzorba foglalható össze. Ennek antiszimmetrikus része az impulzusmomentum tenzora, szimmetrikus része pedig — hasonlóan a kétdimenziós esetben szerepelt S_1, S_3 mennyiségekhez — a különféle irányok mentén végbemenő harmonikus oszcillációk korrelációját (konstans fáziskülönbségét) jellemzi. Az S_{ij} spurtalan n -edrendű tenzor az (1a. 41) alatt bevezetett \vec{S} vektornak általánosítása.

A következőkben megvizsgáljuk, miképpen transzformálódnak az S_{ij} tenzor-komponensek, ha $\underline{\alpha}$ -t (4) szerint unitér transzformációknak vetjük alá. Most is, mint a kétdimenziós esetben, az U_n csoport unimoduláris alcsoportjára, SU_n -re szorítkozunk. Most is igaz, hogy U_n bármely U eleme felírható az $U = e^{i\mu} U_0$ alakban, ahol U_0 unimoduláris mátrix. Az $e^{i\mu}$ fázistényező mellőzése az S_{ij} komponensek transzformációját nem érinti.

Az egységmátrixtól első rendben különböző

$$U = 1 - i\gamma \quad (6)$$

mátrixokra szorítkozunk; γ elemeinek második és magasabb hatványait elhanyagoljuk. Az unitaritás feltételéből

$$\gamma^+ = \gamma, \quad (7)$$

az unimodularitás követelményéből

$$Sp\gamma \equiv \gamma_{rr} = 0 \quad (8)$$

következik. (A kétszer előforduló indexekre 1-től n -ig összegezni kell.) Figyelembe véve (8)-at, (6) így is írható:

$$U = 1 - i\gamma_{rs} \mathbf{I}^{(rs)}, \quad (9)$$

ahol

$$I_{ij}^{(rs)} = \delta_{ir} \delta_{js} - \frac{\delta_{ij} \delta_{rs}}{n}. \quad (10)$$

Az $\mathbf{I}^{(rs)}$ mátrixok neve: az SU_n csoport infinitezimális mátrixai. Az $\mathbf{I}^{(rs)}$ -ek a Pauli-féle σ mátrixok általánosításainak tekinthetők az n -dimenziós esetre. Fennáll:

$$[\mathbf{I}^{(rs)}, \mathbf{I}^{(tu)}] = \delta_{st} \mathbf{I}^{(ru)} - \delta_{ur} \mathbf{I}^{(ts)}. \quad (11)$$

Az S_{ij} tenzorkomponensek transzformációs képlete:

$$S'_{ij} = (\delta_{ik} + i\gamma_{ik}^*) (\delta_{jl} - i\gamma_{jl}) S_{kl} = (\delta_{ik} \delta_{jl} - i\gamma_{rs} \mathcal{J}_{ij,kl}^{(rs)}) S_{kl}, \quad (12)$$

ahol

$$\mathcal{J}_{ij,kl}^{(rs)} = \delta_{ik} \delta_{jr} \delta_{ls} - \delta_{is} \delta_{jl} \delta_{kr}. \quad (13)$$

Mint az (12)-ből látható, az α vektorra (4) szerint SU_n elemeit alkalmazva, az S_{ij} tenzorkomponensek egymás között lineárisan transzformálódnak. Ezen lineáris transzformációk az SU_n csoport egy $n^2 - 1$ -dimenziós ábrázolását létesítik. Az $\mathcal{J}^{(rs)}$ $n^2 \times n^2$ -es mátrixok ennek az ábrázolásnak infinitezimális mátrixai. A felcserélési összefüggések (11)-gyel egyező alakúaknak adódnak:

$$[\mathcal{J}^{(rs)}, \mathcal{J}^{(tu)}] = \delta_{st} \mathcal{J}^{(ru)} - \delta_{ur} \mathcal{J}^{(ts)}, \quad (14)$$

összhangban a Lie-csoportok általános elméletével.

Legyen

$$\mathcal{H}_r \equiv \mathcal{J}^{(rr)} \quad (r = 1, 2, \dots, n) \quad (15)$$

(itt r -re nincs összegezés), továbbá

$$\mathcal{E}_{rs} = \mathcal{J}^{(rs)} \quad (r \neq s; \quad r, s = 1, 2, \dots, n). \quad (16)$$

Használni fogjuk továbbá a $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n$ mátrix- n -es jelölésre a $\vec{\mathcal{H}}$ vektorszimbólumot. A (15), (16) jelölésekkel (14)-ből az SU_n csoport Lie-algebrájának felcserélési összefüggéseit az ún. kanonikus (másképpen standard) alakban kapjuk:

$$[\vec{\mathcal{H}}, \vec{\mathcal{H}}] = 0, \quad (17)$$

$$[\vec{\mathcal{H}}, \mathcal{E}_{rs}] = (\vec{e}_r - \vec{e}_s) \mathcal{E}_{rs}, \quad (18)$$

$$[\mathcal{E}_{rs}, \mathcal{E}_{sr}] = (\vec{e}_r - \vec{e}_s) \vec{\mathcal{H}}, \quad (19)$$

$$[\mathcal{E}_{rs}, \mathcal{E}_{tu}] = N_{rs, tu} {}^{pq} \mathcal{E}_{pq} \quad (rs \neq ut); \quad (20)$$

itt

$$N_{rs, tu} {}^{pq} = \begin{cases} 1 & (s = t, \quad u \neq r); \\ -1 & (u = r, \quad s \neq t); \\ 0 & (s \neq t, \quad u \neq r). \end{cases} \quad (21)$$

A (18–19) jobb oldalán álló \tilde{e}_r n -dimenziós vektor s -edik komponense δ_{rs} ; az $\tilde{e}_r - \tilde{e}_s$ ($r \neq s$; $r, s = 1, 2, \dots, n$) vektorok neve: az SU_n csoport gyökei.

A \mathcal{H} mátrixvektor sajátértékeit, melyeket ugyancsak n -komponensű vektorokká foglalunk össze, az adott ábrázoláshoz tartozó súlyoknak nevezik. Esetünkben a súlyok, mint az (13), (15) alapján megállapítható:

$$\tilde{e}_r - \tilde{e}_s \quad (r, s = 1, 2, \dots, n). \quad (22)$$

Válasszuk a \mathcal{H} mátrixvektor komponenseinek közös sajátvektor-rendszerét az ábrázolás terében teljes alaprendszernek. A (18) összefüggés felhasználásával azt találjuk, hogy kiindulva ezen alapvektorok bármelyikéből, alkalmasan választott \mathcal{E}_{rs} mátrixok alkalmazásával akármelyik alapvektor előállítható. Látható ebből, hogy az SU_n csoport ezen ábrázolása — mely (12) szerint az S_{ij} tenzorkomponensek transzformációját meghatározza — irreducibilis. Az SU_n csoport most megismert ábrázolásának neve: adjungált vagy reguláris ábrázolás. Erre jellemző, hogy — amint az (22)-ből látható — zérustól különböző súlyai a csoport gyökeivel egyenlők, továbbá, hogy foka a csoport rendjével (a független paraméterek számával) megegyezik. Az SU_n csoportnak ez a legalacsonyabb fokú olyan nemtriviális ábrázolása, mely komplex konjugáltjával ekvivalens. Elejtve az utóbbi feltételt, a legalacsonyabb fokú nemtriviális ábrázolás természetesen SU_n önábrázolása. Az $n=2$ esetben, melyet fontossága miatt az 1a. szakaszban különös részletességgel tárgyaltunk, az önábrázolás az $\alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}$ kétdimenziós komplex vektorok (vagy az impulzusmomentum $1/2$ értékéhez tartozó spinfüggvények, a spinorok) transzformációját szabja meg, a reguláris ábrázolást pedig a háromdimenziós valós vektorok forgás-transzformációi létesítik.

2. Egyszerű kvantummechanikai sajátértékfeladatok csoportelméleti szerkezete

2a. A kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor és az impulzusmomentum

Az oszcillátor

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega^2}{2} x^2 \quad (1)$$

Hamilton-operátora az (1a. 4) alatt bevezetett α -val nagymértékben analóg

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{i}{m\omega} p \right), \quad (2a)$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right) \quad (2b)$$

új változók felhasználásával a

$$\mathcal{H} = \frac{\hbar\omega}{2} (a^+ a + a a^+) \quad (3)$$

alakba írható. A

$$px - xp = \frac{\hbar}{i} \quad (4)$$

Heisenberg-féle felcserélési összefüggésekből az a, a^+ operátorokra

$$aa^+ - a^+a = 1 \quad (5)$$

következik. Figyelembe véve (5)-öt, a (3) Hamilton-operátor így is írható:

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2}). \quad (6)$$

Az (5) felcserélési összefüggéseket teljesítik az a, a^+ operátorokat reprezentáló következő végtelen mátrixok:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Az $\mathcal{N} = a^+a$ operátor mátrixát képezve azt találjuk, hogy az átlós alakú, és sajátértékei a nemnegatív egész számok:

$$\mathcal{N} = a^+a = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Ezzel a (6) Hamilton-operátor így írható:

$$\mathcal{H} = \hbar\omega(\mathcal{N} + \frac{1}{2}). \quad (9)$$

A sajátértékek: $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, ahol $n=0, 1, 2, \dots$.

Az \mathcal{N} operátor, melynek sajátértékspektrumát a nemnegatív egész számok alkotják, valamint az a, a^+ operátorok, melyekből \mathcal{N} felépül, várhatóan a Planck-féle oszcillátor mellett más kvantummechanikai sajátértékfeladatok esetében is alkalmazhatók, midőn a fizikai mennyiségek egészszámúságával találjuk magunkat szemben. A következőkben az impulzusmomentum sajátértékfeladatának megoldására használjuk fel az a, a^+, \mathcal{N} operátorokat. A tárgyalás alapját a kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor és a háromdimenziós forgáscsoport között fennálló kapcsolat képezi, mellyel a klasszikus elmélet keretei között az 1a. szakaszban foglalkoztunk.

A kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor

$$H = \frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}(x_1^2 + x_2^2) \quad (10)$$

Hamilton-operátora két (1) típusú Hamilton-operátor összege:

$$H = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2. \quad (11)$$

A megfelelő koordináták és impulzusok felcserélési összefüggései:

$$\left. \begin{aligned} x_1 x_2 - x_2 x_1 &= 0, \\ p_1 p_2 - p_2 p_1 &= 0, \\ p_r x_s - x_s p_r &= \frac{\hbar}{i} \delta_{rs} \quad (r, s = 1, 2). \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

Mindkét szabadsági fokhoz (dimenzióhoz) rendelünk egy-egy, a (7), ill. (8) mátrixokkal reprezentált a , a^+ , valamint \mathcal{N} operátort. Az előbbiekre

$$\left. \begin{aligned} a_1 a_2 - a_2 a_1 &= 0, \\ a_1^+ a_2^+ - a_2^+ a_1^+ &= 0, \\ a_r a_s^+ - a_s^+ a_r &= \delta_{rs} \quad (r, s = 1, 2) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

teljesül. A Hamilton-operátor így írható:

$$H = \hbar \omega (N + 1); \quad (14)$$

itt

$$N = \mathcal{N}_1 + \mathcal{N}_2, \quad (15)$$

ahol

$$\mathcal{N}_1 = a_1^+ a_1, \quad \mathcal{N}_2 = a_2^+ a_2, \quad (16)$$

vagy tömörebben, bevezetve az $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, $\underline{a}^+ = \begin{pmatrix} a_1^+ \\ a_2^+ \end{pmatrix}$ vektoroperátorokat:

$$N = \underline{a}^+ \underline{a}. \quad (17)$$

Definiáljuk (1a. 10)-zel, ill. (1a. 41)-gyel szoros analógiában az

$$R_1 = \frac{1}{2} (a_1^+ a_2 + a_2^+ a_1) = \frac{1}{2} \underline{a}^+ \sigma_1 \underline{a}, \quad (18a)$$

$$R_2 = \frac{1}{2i} (a_1^+ a_2 - a_2^+ a_1) = \frac{1}{2} \underline{a}^+ \sigma_2 \underline{a}, \quad (18b)$$

$$R_3 = \frac{1}{2} (a_1^+ a_1 - a_2^+ a_2) = \frac{1}{2} \underline{a}^+ \sigma_3 \underline{a} \quad (18c)$$

operátorokat, melyeket összefoglaló módon az

$$\vec{R} = \frac{1}{2} \underline{a}^+ \vec{\sigma} \underline{a} \quad (19)$$

szimbólummal is fogunk jelölni.

Az R_i operátorok H -val (vagy N -nel) felcserélhetők. Képezzük most az $[R_i, R_j] \equiv R_i R_j - R_j R_i$ kommutátort. Felhasználva a (18) képleteket, írható:

$$[R_i, R_j] = \frac{1}{4} [\underline{a}^+ \sigma_i \underline{a}, \underline{a}^+ \sigma_j \underline{a}] = \frac{1}{4} \sigma_{pq}^{(i)} \sigma_{rs}^{(j)} [a_p^+ a_q, a_r^+ a_s]. \quad (20)$$

Fennáll:

$$[a_p^+ a_q, a_r^+ a_s] = a_p^+ [a_q, a_r^+] a_s + a_r^+ [a_p^+ a_s] a_q. \quad (21)$$

Tekintetbe véve a (13), (1a. 40), (18) képleteket, az impulzusmomentum jól ismert alakú felcserélési összefüggéseit kapjuk:

$$[R_i, R_j] = i\varepsilon_{ijk} R_k. \quad (22)$$

Képezzük most az $\vec{R}^2 = R_1^2 + R_2^2 + R_3^2$ operátort. Írható:

$$\vec{R}^2 = \frac{1}{4} \vec{\sigma}_{pq} \vec{\sigma}_{rs} a_p^+ a_q a_r^+ a_s. \quad (23)$$

Figyelembe véve a

$$\vec{\sigma}_{pq} \vec{\sigma}_{rs} = 2\delta_{ps}\delta_{qr} - \delta_{pq}\delta_{rs} \quad (24)$$

összefüggést, és (13) segítségével átrendezést végrehajtva, kapjuk:

$$\vec{R}^2 = \frac{1}{2} N (\frac{1}{2} N + 1). \quad (25)$$

Jegyezzük fel még az R_3 operátor (18c) és (16) alapján adódó

$$R_3 = \frac{1}{2} (\mathcal{N}_1 - \mathcal{N}_2) \quad (26)$$

alakját. Figyelembe véve (15)-öt, továbbá, hogy az $\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2$ operátorok — melyek mátrixának átlós alakját (8) mutatja — a 0, 1, 2, ... sajátértékekkel rendelkeznek, innen leolvasható az ismert eredmény:

Az \vec{R}^2 operátor sajátértékei $j(j+1)$ alakúak, ahol $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$; j adott értékéhez az R_3 operátor m sajátértékének $m=j, j-1, \dots, -j$ értékei tartoznak. Felírható továbbá az $R_{\pm} = R_1 \pm iR_2$ operátorok hatását megadó képletek is. Mint (18a—b) mutatja.

$$R_+ = a_1^+ a_2, \quad R_- = a_2^+ a_1. \quad (27)$$

Az

$$\vec{R}^2 \xi_{jm} = j(j+1) \xi_{jm}, \quad (28)$$

$$R_3 \xi_{jm} = m \xi_{jm}, \quad (29)$$

vagy az ezekkel egyenértékű

$$\mathcal{N}_1 \xi_{jm} = (j+m) \xi_{jm}, \quad (30)$$

$$\mathcal{N}_2 \xi_{jm} = (j-m) \xi_{jm} \quad (31)$$

sajátértékegyenleteket teljesítő ξ_{jm} sajátvektorokra, mint az (7) segítségével megállapítható, a (27) operátorok a következőképpen hatnak:

$$R_+ \xi_{jm} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \xi_{j, m+1}, \quad (32)$$

$$R_- \xi_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \xi_{j, m-1}. \quad (33)$$

Egyszerűen belátható, hogy az R_1, R_2, R_3 operátorok fentiekben talált, (29), (32), (33) által meghatározott mátrixai a (22) felcserélési összefüggések valamennyi nem-ekvivalens megoldását kimerítik.

Ha azt az álláspontot foglaljuk el, hogy a (10), (12) (13) alatt szereplő x_i, p_j , ill. a_i, a_j^+ operátorok pusztán segédmenntényiségek, s a megfelelő kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor mozgása egy fiktív kétdimenziós térben megy végbe, (19) azonosítható valamely fizikai rendszer impulzusmomentum-operátorával. Ezen kiindulópont választása mellett kiépíthető az impulzusmomentum egész kvantummechanikai elmélete. Mint érdekességet megemlítjük, hogy ezen keretek között a

feles impulzusmomentum operátora is felépíthető differenciáloperátorok segítségével. Valóban, az x_i -hez konjugált $p_i \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_i}$ -vel, vagy $a_i \frac{\partial}{\partial a_i^+}$ -tel reprezentálható.

Egy másik lehetséges nézőpont, melyet az 1a. szakaszban a klasszikus elmélet keretei között foglaltunk el, \vec{R} -et tekinti egy fiktív háromdimenziós tér vektorának. A segédmenyiségként bevezetett \vec{R} segítségével érdekes megállapítások tehetők a kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor elfajult sajátérték-feladatának csoportelméleti szerkezetéről.

Kiválasztva két független fizikai mennyiséget reprezentáló felcserélhető operátort, és meghatározva ezek közös sajátvektorainak egy teljes rendszerét, az állapotterben egy teljes alaprendszert nyerünk. Válasszuk e célból a $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ vagy az ezekkel a (9) minta szerint összefüggő $\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2$ operátorokat. A teljes rendszert szolgáltató sajátvektorok ekkor az ezen operátorok sajátértékeiből képezett n_1, n_2 számpárokkal jellemezhetők (n_1, n_2 nemnegatív egész). Ezek az állapotvektorok szerepelnek (28—33) alatt is; ξ_{jm} jellemzői:

$$n_1 = j + m, \quad n_2 = j - m. \quad (34)$$

A félreértés veszélye nélkül ξ_{jm} helyett alternatívén $\xi_{n_1 n_2}$ is írható.

A H operátor sajátértékeit az $n_1 + n_2$ összeg meghatározza. Azaz n_1, n_2 számpárok, amelyekre $n_1 + n_2$ ugyanaz az n érték, azonos energiájú, elfajult állapotokat jellemeznek. A lineárisan független, elfajult állapotok száma adott $n_1 + n_2 = n$ -re $n + 1$ -gyel egyenlő. Az azokat jellemző számpárok nyilvánvalóan a következők:

$$n_1, n_2 = n, 0; \quad n - 1, 1; \dots; \quad 1, n - 1; \quad 0, n. \quad (35)$$

A kétdimenziós izotróp harmonikus oszcillátor ezen elfajulása szorosan összefügg a H -val felcserélhető (18—19), ill. (27) operátorok létezésével. Valóban, a

$$[H, \vec{R}] = 0 \quad (36)$$

egyenletből következik, hogy ha

$$H \xi_{n_1 n_2} = \hbar \omega (n + 1) \xi_{n_1 n_2}, \quad (37)$$

úgy az

$$R_+ \xi_{n_1 n_2} = \sqrt{(n_1 + 1)n_2} \xi_{n_1 + 1, n_2 - 1}, \quad (38)$$

$$R_- \xi_{n_1 n_2} = \sqrt{n_1(n_2 + 1)} \xi_{n_1 - 1, n_2 + 1} \quad (39)$$

állapotvektorok ugyancsak sajátvektorai H -nak, ugyanazon sajátérték mellett. Ugyanez elmondható természetesen az

$$R_+^k \xi_{n_1 n_2} = \sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + 2) \dots (n_1 + k) n_2 (n_2 - 1) \dots (n_2 - k + 1)} \xi_{n_1 + k, n_2 - k}, \quad (40)$$

$$R_-^k \xi_{n_1 n_2} = \sqrt{n_1 (n_1 - 1) \dots (n_1 - k + 1) (n_2 + 1) (n_2 + 2) \dots (n_2 + k)} \xi_{n_1 - k, n_2 + k} \quad (41)$$

állapotvektorokról is. Kiindulva tehát valamely tetszőleges $\xi_{n_1 n_2}$ sajátvektorból ($n_1 + n_2 = n$), az R_{\pm} operátorok ismételt alkalmazásával a (35) számpárok jellemezte bármely sajátvektor előállítható.

Mintthogy az \vec{R} operátor hermitikus, a belőle képezett

$$U = 1 - i\delta \vec{\phi} \vec{R} \quad (42)$$

operátor unitér; itt feltesszük, hogy $\delta\vec{\varphi}$ második és magasabb hatványai elhanyagolhatók. Vessük alá először \vec{R} -et (42) segítségével hasonlósági transzformációnak; (22)-t tekintetbe véve kapjuk:

$$\vec{R}' = U^+ \vec{R} U = \vec{R} + i[\delta\vec{\varphi} \vec{R}, \vec{R}] = \vec{R} + \delta\vec{\varphi} \times \vec{R}. \quad (43)$$

Az U segítségével elvégzett hasonlósági transzformáció az \vec{R} vektoroperátor $\delta\vec{\varphi}$ forgásvektorú infinitezimális elforgatását eredményezi. — Most \underline{a} -t vessük alá hasonlósági transzformációnak; (18—19) és (13) figyelembevételével kapjuk:

$$\underline{a}' = U^+ \underline{a} U = \underline{a} + i[\delta\vec{\varphi} \vec{R}, \underline{a}] = \left(1 - \frac{i}{2} \delta\vec{\varphi} \vec{\sigma}\right) \underline{a}. \quad (44)$$

Megjegyezzük, hogy az infinitezimális $\delta\vec{\varphi}$ forgásvektor esetére érvényes (43—44) képletekből kiindulva az általánosabb transzformációk esetére érvényes képletek is megkaphatók. Legyen $\vec{\varphi}$ tetszőlegesen adott és végezzünk a (42) alatt felírt U operátorral a $\delta\vec{\varphi} = \vec{\varphi}/N$ választás mellett (N elég nagy egész) N -szer egymás után hasonlósági transzformációt. Ily módon (43) és (44) helyett kapjuk:

$$\vec{R}' = \left(1 + i \frac{\vec{\varphi} \vec{R}}{N}\right)^N \vec{R} \left(1 - i \frac{\vec{\varphi} \vec{R}}{N}\right)^N = \left(1 + \frac{\vec{\varphi} \times}{N}\right)^N \vec{R}, \quad (45)$$

$$\underline{a}' = \left(1 + i \frac{\vec{\varphi} \vec{R}}{N}\right)^N \underline{a} \left(1 - i \frac{\vec{\varphi} \vec{R}}{N}\right)^N = \left(1 - \frac{i}{2} \frac{\vec{\varphi} \vec{\sigma}}{N}\right)^N \underline{a}. \quad (46)$$

Figyelembe véve az exponenciális függvény értelmezését, az $N \rightarrow \infty$ határátmenetet elvégezve írható:

$$\vec{R}' = e^{i\vec{\varphi} \vec{R}} \vec{R} e^{-i\vec{\varphi} \vec{R}} = e^{\vec{\varphi} \times} \vec{R}, \quad (47)$$

$$\underline{a}' = e^{i\vec{\varphi} \vec{R}} \underline{a} e^{-i\vec{\varphi} \vec{R}} = e^{-\frac{i}{2} \vec{\varphi} \vec{\sigma}} \underline{a}. \quad (48)$$

Felhasználva az exponenciális, szinusz és koszinusz függvények hatványsorait, (47—48)-nak még a következő alak is adható (a $\varphi = |\vec{\varphi}|$, $\vec{n} = \vec{\varphi}/\varphi$ jelölést alkalmazzuk):

$$\vec{R}' = (\vec{n} \vec{R}) \vec{n} + (\vec{n} \times \vec{R}) \times \vec{n} \cos \varphi + \vec{n} \times \vec{R} \sin \varphi, \quad (49)$$

$$\underline{a}' = \left(\cos \frac{\varphi}{2} - i \vec{n} \vec{\sigma} \sin \frac{\varphi}{2} \right) \underline{a}. \quad (50)$$

Az \vec{R} operátor komponenseit az $U(\vec{\varphi}) = e^{i\vec{\varphi} \vec{R}}$ unitér operátorokkal leírt transzformációk infinitezimális generátorainak nevezik. Mint (49—50), valamint (1a. 37), (1a. 46) összehasonlítása mutatja, ezek az infinitezimális generátorok az \vec{R} vektor $\vec{\varphi}$ forgásvektorú elforgatásait, továbbá a kétkomponensű \underline{a} mennyiség unimoduláris unitér transzformációit — azaz: R_3 és SU_2 elemeit — generálják. Az \vec{R} vektoroperátor s a H Hamilton-operátor felcserélhetőségéből következik, hogy az \vec{R} komponensei által generált transzformációk szimmetriacsoportját alkotják H -nak.

Mint az (29—33), ill. (38—41) segítségével belátható, az $U(\vec{\varphi}) = e^{i\vec{\varphi} \vec{R}}$ unitér operátorok a H operátor adott $\hbar\omega(n+1)$ sajátértékéhez tartozó $\xi_{n_1 n_2}$ sajátvektorokat

$(n_1 + n_2 = n)$ egymás között lineárisan transzformálják. Ezek a lineáris transzformációk az SU_2 csoport ábrázolását alkotják. Minthogy az $R_{\pm} = R_1 \pm iR_2$ operátorok ismételt alkalmazásával adott sajátvektorból az adott sajátértékhez tartozó bármely sajátvektor előállítható, a nyert ábrázolás irreducibilis. A Hamilton-operátor

$\hbar\omega(n+1)$ sajátértékéhez tartozó irreducibilis ábrázolás szokásos jele $D^{\frac{n}{2}}$. A két-dimenziós izotróp harmonikus oszcillátor állapotterében SU_2 valamennyi inekvivalens irreducibilis ábrázolása pontosan egyszer fellép.

2b. A Coulomb-tér sajátértékfeladatának magasabb szimmetriái

A vonzó Coulomb-erőtérben mozgó töltött részecske (H atom) kvantummechanikai sajátértékfeladata (a Kepler-probléma kvantummechanikai megfelelője), mint azt V. A. Fock 1935-ben írott híres munkájából tudjuk, a megszokott geometriai szimmetriáknál magasabb fokú szimmetriával rendelkezik: invarianciát mutat a négydimenziós forgás-, ill. Lorentz-csoporttal szemben. Ez a szimmetria az idézett dolgozatban a következő módon válik láthatóvá: a háromdimenziós impulzusteret sztereografikusan projiciálva a négydimenziós euklideszi tér egy hipergömbjére, a H atom impulzusábrázolásban felírt Schrödinger-egyenlete a négydimenziós gömbfüggvények integrálegyenletének alakját ölti.

Ezen megfontolásokkal kapcsolatban több kézenfekvő kérdés vethető fel. Kíváncsún tarthatjuk, hogy a mondott magasabb szimmetriák kifejezést nyerjenek anélkül, hogy a speciális impulzusábrázolást választanánk. Meglepőnek találhatjuk továbbá, hogy a hidrogén-probléma magasabb szimmetriájának felfedezésére majdnem tíz évvel az után került sor, hogy Schrödinger először tárgyalta azt koordinátaábrázolásban (mind gömbi, mind parabolikus koordináták választása mellett). Mi magyarázza azt, hogy ez a magasabb szimmetria nem jelentkezik szembeszökően koordinátaábrázolásban, ill. megadható-e koordinátaábrázolásban olyan tárgyalás, mely szembeszökően kifejezésre juttatná ezt a magasabb szimmetriát?

Az 1b—c. szakaszokban láttuk, miképpen jelentkezik ezen magasabb szimmetria a klasszikus elmélet keretei között. Ezek a kérdések az ott tett megállapítások alapján megválaszolhatók. Az (1c. 17) képlet mutatja, hogy az erőcentrumra vonatkoztatott x_1, x_2, x_3 derékszögű koordinátákból kiindulva megalkothatók egy q_x négyesvektor komponensei; maguk az x_i koordináták azonban nem négyesvektor-komponensek és nem mutatnak egyszerű tulajdonságot a négydimenziós transzformációkkal szemben. Ez magyarázza, hogy az erőcentrumra vonatkoztatott x_i derékszögű koordináták (s az azokból származtatott gömbi vagy parabolikus koordináták) használata mellett a probléma magasabb szimmetriája nem jut kifejezésre szembeszökő módon. A q_x komponensekhez (1c. 28) szerint kanonikusan konjugált π_x négyesvektor (1c. 18) értelmében ($E < 0$ mellett) a négydimenziós euklideszi tér p_0 sugarú hipergömbjének vektora. Az (1c. 16) képletek ezen hipergömb, valamint a háromdimenziós impulzustér pontjai között sztereografikus projekció útján létesítenek megfeleltetést. Ez érthetővé teszi, hogy impulzusábrázolásban a négydimenziós térbeli magasabb szimmetria sztereografikus projekció alkalmazásával volt felismerhető.

Az (1c. 17) alatt megadott q_x négyesvektor-komponensek közül az első három jelentése a klasszikus elméletben: az ellipszispálya centrumára vonatkoztatott

derékszögű koordináták. Bár ezek a fogalmak: pálya és annak centruma, a kvantummechanikában nem értelmezhetők, a klasszikus q_α mennyiségeknek megfelelő változókat a kvantummechanikában is bevezethetjük.

A kvantummechanikai tárgyalás előkészítéseképpen mindenképp az 1b—c. szakaszok néhány alapvető összefüggését át kell ültetnünk a kvantummechanikába. Az \underline{L} impulzusmomentum-operátor természetesen most is (1b. 1) szerint épül fel a helyzetvektor \underline{r} és az impulzus \underline{p} operátorából. Ha azonban az excentricitásvektor $\underline{\varepsilon}$ operátorát az (1b. 5) mintára definiálnánk, az nem adódnék hermitikusnak. A megfelelő kvantummechanikai összefüggés:

$$\underline{\varepsilon} = \frac{\underline{r}}{r} + \frac{\underline{L} \times \underline{p} - \underline{p} \times \underline{L}}{2cm}. \quad (1)$$

Az állapottér azon alterében, amelyben a \mathcal{H} Hamilton-operátor negatív definit (kötött állapotok), az (1c. 15) klasszikus vektorhoz rendelt operátort az

$$\underline{A} = c \left(\frac{m}{-2\mathcal{H}} \right)^{\frac{1}{2}} \underline{\varepsilon} \quad (2)$$

képlet értelmezi. A $[p_r, x_s] = \frac{\hbar}{i} \delta_{rs}$ Heisenberg-féle felcserélési összefüggésekből kiindulva az \underline{L} , \underline{A} operátorokra kapjuk:

$$[L_r, L_s] = i\hbar \varepsilon_{rst} L_t, \quad (3)$$

$$[A_r, A_s] = i\hbar \varepsilon_{rst} L_t, \quad (4)$$

$$[L_r, A_s] = i\hbar \varepsilon_{rst} A_t, \quad (5)$$

$$[L_r, A_r] = 0. \quad (6)$$

[A (6) képletben a kétszer előforduló r indexre nem kell összegezni.] Az (1b. 16) összefüggés megfelelője a kvantummechanikában:

$$\mathcal{H} = -\frac{c^2 m}{2} (\underline{A}^2 + \underline{L}^2 + \hbar^2)^{-1}. \quad (7)$$

Minthogy az $\underline{A}^2 + \underline{L}^2 + \hbar^2$ operátor a kötött állapotok alterében, melyre most szorítkozunk, pozitív definit, a (7)-ben szereplő inverz operátor értelmezve van. Bevezetve (1c. 6) szerint az antiszimmetrikus tenzor operátort, (7) helyett írhatjuk:

$$\mathcal{H} = -c^2 m (F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} + 2\hbar^2)^{-1} \quad (8)$$

A $\hbar \rightarrow 0$ határesetben a (7) és (8) képletek (1b. 16)-ba, ill. (1c. 27)-be mennek át.

Olyan ábrázolást kívánunk választani, amelyben a klasszikus elmélet (1c. 17) négyesvektorának komponenseihez a megfelelő q_α számokkal való szorzást rendeljük. A π_α komponenseknek, melyek (1c. 28) szerint a q_α komponensek kanonikus konjugáltjai, ekkor a $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_\alpha}$ differenciáloperátorokat kell megfeleltetni. Az $F_{\alpha\beta}$ tenzorkomponensek operátorai számára így módon (1c. 25) alapján az

$$F_{\alpha\beta} = \frac{\hbar}{i} \left(q_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\beta} - q_\beta \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \right) \quad (9)$$

előállítás adódik. Meg lehet győződni róla, hogy az $F_{\alpha\beta}$ tenzorban összefoglalt L , A mozgásállandók ezen előállítására megoldását szolgáltatja a (3–6) felcserélési összefüggéseknek.

Keressük az $\frac{1}{2} F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}$ operátor

$$\frac{1}{2} F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta} \psi = \lambda \psi \quad (10)$$

sajátértékfeladatának megoldásait. A λ sajátérték, mint az (8)-ből látható, a \mathcal{H} operátor sajátértékével, azaz a vonzó Coulomb-térben kötött részecske E energiájával az

$$E = -\frac{c^2 m}{2(\lambda + \hbar^2)} \quad (11)$$

kapcsolatban áll. Legyen $f(q_1 q_2 q_3 q_4)$ n^* -adfokú homogén harmonikus polinom a négydimenziós térben:

$$q_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\alpha} f(q_1 q_2 q_3 q_4) = n^* f(q_1 q_2 q_3 q_4), \quad (12)$$

$$\square f(q_1 q_2 q_3 q_4) = 0. \quad (13)$$

Tekintetbe véve az $\frac{1}{2} F_{\alpha\beta} F_{\alpha\beta}$ operátor (9) felhasználásával adódó

$$\frac{1}{2} F_{\alpha\beta} F_{\alpha\mu} = \hbar^2 \left\{ q_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\alpha} \left(q_\alpha \frac{\partial}{\partial q_\alpha} + 2 \right) - q_\alpha q_\alpha \square \right\} \quad (14)$$

előállítását, látható, hogy $f(q_1 q_2 q_3 q_4)$ megoldása a (10) sajátértékegyenletnek a

$$\lambda = \hbar^2 n^*(n^* + 2) \quad (n^* = 0, 1, 2, \dots) \quad (15)$$

sajátérték mellett. Behelyettesítve (15)-öt (11)-be és bevezetve a megszokott $n = n^* + 1$ főkvantumszámot, megkapjuk a H atom Balmer-képletét:

$$E = -\frac{c^2 m}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (16)$$

Tekintettel az (Ic.19) feltételre, az $f(q_1 q_2 q_3 q_4)$ sajátfüggvények értelmezési tartománya egy a sugarú hipergömbfelület a négydimenziós térben. A közölt tárgyalás, melyben a választott ábrázolást az jellemzi, hogy a q_α négyesvektor-komponens operátora a q_α -val való szorzás, szembeszökően kifejezésre juttatja a Coulomb-probléma négydimenziós szimmetriáját. Valamely adott λ , ill. E sajátértékhez tartozó lineárisan független sajátfüggvények sorozata alapfüggvényrendszerét képezi a négydimenziós forgáscsoport egy irreducibilis ábrázolásának. Ezt az ábrázolást a (9) operátorok generálják; foka (a lineárisan független sajátfüggvények száma) n^2 -tel egyenlő. Megjegyezzük, hogy a négydimenziós forgáscsoportnak nem minden irreducibilis ábrázolása lép fel itt; a sajátfüggvények az a sugarú hipergömbön azonban természetesen teljes rendszert alkotnak. Megjegyezzük végül, hogy a közölt tárgyalás — melyet a Kepler-probléma klasszikus négydimenziós geometriai-kinetikai modelljére építettünk fel — tagadhatatlanul bizonyos heurisztikus vonásokat mutat.

Megadható a Coulomb-tér sajátértékfeladatának egy olyan tárgyalása, mely ugyancsak alkalmas a probléma magasabb szimmetriájának kidomborítására, és amely az energiasajátértékek meghatározásához nem a Schrödinger-féle parciális differenciálegyenletet veszi alapul, hanem a kvantummechanikai operátorok algebrai (felcserélési) tulajdonságaira támaszkodik. Ezt a tárgyalásmódot egyszersmind felhasználjuk arra, hogy megválaszoljunk egy további kézenfekvő kérdést (mely természetesen inkább matematikai érdekességű): Milyen csoportelméleti tulajdonságokkal rendelkezik a Coulomb-probléma f -dimenziós általánosítása?

A probléma Hamilton-operátora:

$$H = \frac{1}{2m} p_r p_r - \frac{c}{(x_r x_r)^{\frac{1}{2}}}. \quad (17)$$

(Itt és a következőkben a kétszer előforduló indexekre 1-től f -ig kell összegezni.) Látható, hogy az f -dimenziós forgáscsoport szimmetriacsoportja H -nak. Ezen csoport infinitezimális generátorai az impulzusmomentum tenzorának $\begin{pmatrix} f \\ 2 \end{pmatrix}$ számú

$$L_{rs} = x_r p_s - x_s p_r \quad (r, s = 1, 2, \dots, f) \quad (18)$$

komponense, melyek felcserélhetők H -val. További mozgásállandókat szolgáltatnak a (2) alatt definiált A vektor általánosításával nyert f -dimenziós vektor

$$\begin{aligned} A_r &= c \left(-\frac{m}{2H} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x_r}{(x_s x_s)^{\frac{1}{2}}} + \frac{L_{sr} p_s + p_s L_{sr}}{2cm} \right) = \\ &= c \left(-\frac{m}{2H} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x_r}{(x_s x_s)^{\frac{1}{2}}} + \frac{L_{sr} p_s}{cm} + \frac{\hbar(f-1)}{2icm} p_r \right) \quad (r = 1, 2, \dots, f) \end{aligned} \quad (19)$$

komponensei. Foglalkozunk bele az L_{rs} , A_r mozgásállandókat, melyek száma $\begin{pmatrix} f \\ 2 \end{pmatrix} + f = \begin{pmatrix} f+1 \\ 2 \end{pmatrix}$, egy $f+1$ -dimenziós antiszimmetrikus tenzorba az

$$\begin{cases} F_{rs} = L_{rs} & (r, s = 1, 2, \dots, f), \\ F_{r, f+1} = -F_{f+1, r} = A_r & (r = 1, 2, \dots, f) \end{cases} \quad (20)$$

képletek szerint. Ennek komponensei a következő felcserélési összefüggéseknek tesznek eleget:

$$\begin{aligned} [F_{rs}, F_{tu}] &= i\hbar(\delta_{ru} F_{ts} + \delta_{st} F_{ur} + \delta_{rt} F_{su} + \delta_{su} F_{rt}), \\ &(r, s, t, u = 1, 2, \dots, f+1). \end{aligned} \quad (21)$$

Az $f+1$ -dimenziós forgáscsoport Lie-algebrájának felcserélési összefüggéseit kaptuk.

A (17–20) képletek felhasználásával kapjuk:

$$H = -c^2 m \left[F_{rs} F_{rs} + 2\hbar^2 \left(\frac{f-1}{2} \right)^2 \right]^{-1} \quad (22)$$

[vö. a (8) képlettel]. Itt a kétszer előforduló indexekre 1-től $f+1$ -ig kell összegezni. Az $\frac{1}{2} F_{rs} F_{rs}$ operátor az $f+1$ -dimenziós forgáscsoport Casimir-operátora, melynek sajátértéke, mint az (21)-ből következik, $\hbar^2 N(N+f-1)$ -gyel egyenlő, ahol N nem-

negatív egész szám. Ezt felhasználva (22)-ből kapjuk:

$$E_N = -\frac{c^2 m}{2\hbar^2 \left(N + \frac{f+1}{2}\right)^2} \quad (N = 0, 1, 2, \dots). \quad (23)$$

A kapott képlet mindenek előtt általánosítása a H atom (16) Balmer-képletének, továbbá a Loudon által levezetett egy- s a Jauch és Hill által nyert kétdimenziós Balmer-formulának. (Az egydimenziós hidrogénatom tárgyalásának az excitonok elméletében van jelentősége.)

A fentiekben a kötött állapotok tárgyalására szorítkoztunk. Analóg módon tárgyalható a pozitív energiák esete, mikor is az $f+1$ -dimenziós forgáscsoport helyét az $f+1$ -dimenziós Lorentz-csoport (egy időszerű dimenzióval) foglalja el.

2c. A térbeli izotróp harmonikus oszcillátor és az SU_3 csoport

Az n -dimenziós izotróp harmonikus oszcillátor szimmetriacsoportját: az SU_n csoportot a klasszikus elmélet keretei között az 1d. szakaszban tárgyaltuk. A megfelelő kvantummechanikai sajátértékfeladat ezen csoporttal szemben mutatott szimmetria folyományaképpen erősen elfajult. Az $n=2$ esetet vizsgálva a 2a. szakaszban szoros összefüggést találtunk az elfajulás, valamint a Hamilton-operátorral felcserélhető, az impulzusmomentum felcserélési összefüggéseit kielégítő operátorok létezése között. Az általános esetben hasonló összefüggés áll fenn az elfajulás, valamint az (1d. 11) vagy az (1d. 14), ill. (1d. 17–20) csererelációkat teljesítő, a Hamilton-operátorral kommutáló operátorok létezése között. A következőkben azonban figyelmünket a térbeli izotróp harmonikus oszcillátor ($n=3$) esetére korlátozzuk, melynek szimmetriacsoportja, az SU_3 csoport oly fontos szerepet tölt be az atommagok és az elemi részecskék elméletében. Tetszőleges n esete nagymértékben analóg módon tárgyalható.

A

$$H = \frac{1}{2m} (p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) \quad (1)$$

Hamilton-operátor a (2a. 2) mintára bevezetett a_r, a_r^+ ($r=1, 2, 3$) operátorok felhasználásával a

$$H = \hbar\omega \left(\underline{a}^+ \underline{a} + \frac{3}{2} \right) \quad (2)$$

alakba írható. Itt az $\underline{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix}$, $\underline{a}^+ = \begin{bmatrix} a_1^+ \\ a_2^+ \\ a_3^+ \end{bmatrix}$ vektorjelölést alkalmaztuk. A (2) Hamil-

ton-operátor \underline{a} unitér transzformációival — vagyis U_3 elemeivel — szemben, hasonlóan a megfelelő klasszikus Hamilton-függvényhez, invarianciát mutat.

Az

$$I'_{rs} = a_r^+ a_s \quad (3)$$

alakú mozgásállandók (H -val kommutáló operátorok) száma kilenc. Ezek a követ-

kező felcserélési összefüggéseknek tesznek eleget:

$$[I'_{rs}, I'_{tu}] = \delta_{st} I'_{ru} - \delta_{ur} I'_{ts}. \quad (4)$$

Az U_3 csoport azon elemeire szorítkozunk, amelyek az egységmátrixtól kevésbé különböznek. Ezek (1d. 6) szerint az

$$\underline{U} = 1 - i\underline{\gamma} \quad (5)$$

alakba írhatók, ahol

$$\underline{\gamma}^+ = \underline{\gamma}; \quad (6)$$

$\underline{\gamma}^+$ elemeinek második és magasabb hatványait elhanyagoljuk. Képezzük az

$$U = 1 - i\gamma_{rs} I'_{rs} \quad (7)$$

unitér operátort (a kétszer előforduló indexekre egytől háromig kell összegezni). Vessük alá \underline{a} -t U felhasználásával hasonlósági transzformációnak. Kapjuk:

$$U^+ a U = \underline{U} a. \quad (8)$$

Az I'_{rs} operátorok eszerint U_3 elemeit generálják.

Az U_3 csoport elemeiről alkalmas egységnyi abszolútértékű faktort leválasztva az SU_3 unimoduláris csoport elemeit nyerjük. Az unimodularitás

$$Sp \underline{\gamma} = 0 \quad (9)$$

feltétele a független γ_{rs} mátrixelemek számát kilencről nyolcra korlátozza. A (9) feltételt figyelembe véve (7) helyett írható:

$$U = 1 - i\gamma_{rs} I_{rs}, \quad (10)$$

ahol

$$I_{rs} = a_r^+ a_s - \frac{\delta_{sr}}{3} a^+ a. \quad (11)$$

A (11) operátorok száma kilenc, de közöttük csak nyolc független; fennáll ugyanis az

$$I_{rr} \equiv I_{11} + I_{22} + I_{33} = 0 \quad (12)$$

összefüggés. Az I_{rs} operátorok felcserélési összefüggései (4)-gyel azonos alakúak:

$$[I_{rs}, I_{tu}] = \delta_{st} I_{ru} - \delta_{ur} I_{ts}. \quad (13)$$

A felcserélési összefüggések felírhatók természetesen kanonikus alakban is. Legyen

$$\vec{H}(H_1, H_2, H_3), \quad (14)$$

ahol

$$H_1 = I_{11}, \quad H_2 = I_{22}, \quad H_3 = I_{33} \quad (15)$$

$$(H_1 + H_2 + H_3 = 0);$$

legyen továbbá

$$E_{rs} = I_{rs} \quad (r \neq s). \quad (16)$$

Teljes analógiában (1d. 17—20)-szal írható:

$$[\bar{H}, \bar{H}] = 0, \quad (17)$$

$$[\bar{H}, E_{rs}] = (\tilde{e}_r - \tilde{e}_s) E_{rs}, \quad (18)$$

$$[E_{rs}, E_{sr}] = (\tilde{e}_r - \tilde{e}_s) \bar{H}, \quad (19)$$

$$[E_{rs}, E_{tu}] = N_{rs,tu}{}^{pq} E_{pq} \quad (rs \neq ut), \quad (20)$$

ahol az $N_{rs,tu}{}^{pq}$ együtthatót (1d. 21) határozza meg; az \tilde{e}_r (hármass-) vektor i -edik komponense δ_{ri} . Az $\tilde{e}_r - \tilde{e}_s$ gyökök SU_3 esetében a következők:

$$\tilde{e}_1 - \tilde{e}_2, \quad \tilde{e}_1 - \tilde{e}_3, \quad \tilde{e}_2 - \tilde{e}_3, \quad \tilde{e}_2 - \tilde{e}_1, \quad \tilde{e}_3 - \tilde{e}_1, \quad \tilde{e}_3 - \tilde{e}_2. \quad (21)$$

Hat egyenlő hosszúságú vektorral állunk szemben, melyek mind benne fekszenek az $\tilde{e}_1 + \tilde{e}_2 + \tilde{e}_3$ normálisú síkban s amelyek egymással rendre $+60^\circ$ -os elforgatással adódnak. A (21) vektorok szemléltetése szokásosan az ún Schouten-ábra segítségével történik. Megjegyezzük, hogy a (21) gyökök bármelyike előállítható az $\tilde{e}_1 - \tilde{e}_2$, $\tilde{e}_2 - \tilde{e}_3$ gyökök egész együtthatós lineáris kombinációja alakjában; az együtthatók ténylegesen a 0, ± 1 értékeket veszik fel. Ezen két gyököt az jellemzi, hogy az első el nem tűnő komponensük pozitív; röviden azt mondjuk: pozitív gyökök. Ezenkívül jellemző rájuk, hogy nem állíthatók elő pozitív gyökök összege alakjában. Ezek az SU_3 csoport ún. egyszerű gyökei. Az egyszerű gyökök száma egyenlő a csoport rangjával. Ez esetünkben kettő, ennek megfelelően SU_3 Dynkin-ábráján két csomópont van.

Az (1—2) Hamilton-operátor sajátvektorainak teljes rendszere az

$$a_1^{+n_1} a_2^{+n_2} a_3^{+n_3} |0\rangle \quad (22)$$

alakban írható fel; itt $|0\rangle$ az $n_1 = n_2 = n_3 = 0$ -hoz tartozó sajátvektort jelöli. Látható, hogy a (11) I_{rs} operátorok alkalmazásakor az $n_1 + n_2 + n_3 = n$ adott értékéhez tartozó sajátvektorok egymás között lineáris transzformációt szenvednek. Ezen lineáris transzformációk SU_3 egy-egy ábrázolását létesítik. Meggyőződhetünk róla, hogy tetszőleges (22) állapotvektorból alkalmas I_{rs} (E_{rs}) operátor alkalmazásával az adott n -hez tartozó bármely más állapotvektorhoz eljuthatunk. Ez azt jelenti, hogy a rögzített n -hez tartozó (22) állapotvektorok SU_3 egy irreducibilis ábrázolása szerint transzformálódó vektorteret feszítenek ki. A megfelelő súlyok (14—15), (11) alapján könnyen meghatározhatók. A \bar{H} vektoroperátor i -edik komponensének sajátértéke az n_1, n_2, n_3 ($n = n_1 + n_2 + n_3$) kvantumszámokkal jellemzett állapotban:

$$n_i - \frac{n}{3}. \quad (23)$$

Innen a súlyok az $n = 1$ -hez tartozó irreducibilis ábrázolás esetén:

$$\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{3} - \frac{1}{3}\right), \quad \left(-\frac{1}{3} \frac{2}{3} - \frac{1}{3}\right), \quad \left(-\frac{1}{3} - \frac{1}{3} \frac{2}{3}\right); \quad (24)$$

$n=2$ esetén:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{4}{3} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{2}{3} \right), \quad \left(-\frac{2}{3} \quad \frac{4}{3} \quad \frac{2}{3} \right), \quad \left(-\frac{2}{3} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{4}{3} \right); \\ \left(-\frac{2}{3} \quad \frac{1}{3} \quad \frac{1}{3} \right), \quad \left(\frac{1}{3} \quad \frac{2}{3} \quad \frac{1}{3} \right), \quad \left(\frac{1}{3} \quad \frac{1}{3} \quad \frac{2}{3} \right). \end{array} \right\} \quad (25)$$

Az $n=1$ -hez tartozó irreducibilis ábrázolás (ez SU_3 önábrázolása) háromdimenziós, $n=2$ -höz pedig hatdimenziós irreducibilis ábrázolás tartozik. Az $n=3$ esettel részletesebben foglalkozunk. A megfelelő irreducibilis ábrázolás tízdimenziós és legutóbb nevezetes szerepet játszott az Ω -hiperon felfedezésével kapcsolatban. Ezen ábrázolás terének (22) alapvektorait rendezzük el a következőképpen:

$$\left. \begin{array}{l} a_3^{+3}|0\rangle; \\ a_1^+ a_3^{+2}|0\rangle, \quad a_2^+ a_3^{+2}|0\rangle; \\ a_1^{+2} a_3^+|0\rangle, \quad a_1^+ a_2^+ a_3^+|0\rangle, \quad a_2^{+2} a_3^+|0\rangle; \\ a_1^{+3}|0\rangle, \quad a_1^{+2} a_2^+|0\rangle, \quad a_1^+ a_2^{+2}|0\rangle, \quad a_2^{+3}|0\rangle. \end{array} \right\} \quad (26)$$

Az alapvektorok elrendezése itt csoportelméleti elvek szerint történt. Ha az SU_3 csoport azon SU_2 alcsoportjára szorítkozunk, mely az a_1, a_2 operátorokat transzformálja egymás között, és a_3 -at érintetlenül hagyja, úgy SU_2 -nek reducibilis ábrázolását nyerjük, mely — mint (26)-ból látható — az SU_2 csoport egy-egy 4, 3, 2, 1

dimenziós irreducibilis ábrázolását (a $D^{\frac{3}{2}}, D^1, D^{\frac{1}{2}}, D^0$ ábrázolásokat) tartalmazza. Növeljük meg a z -irányú oszcilláció frekvenciáját ω -ról ω' ($>\omega$)-ra. Ez azt jelenti, hogy (2)-höz a $\hbar(\omega' - \omega)a_3^+ a_3$ perturbáló tag járul, mely a (26) első, második, harmadik, negyedik sorában levő állapotok energiáját rendre a $3\hbar\Delta\omega, 2\hbar\Delta\omega, \hbar\Delta\omega$ és 0 értékekkel növeli meg. A perturbáló tag megsérti H invarianciáját SU_3 -mal szemben, ennél fogva az SU_3 -mal szemben mutatott invarianciával kapcsolatos elfajulás feloldódik. A megmaradt elfajulás visszatükrözi az SU_2 csoporttal szemben továbbra is fennálló invarianciát.

Hasonló csoportelméleti szerkezetet mutatnak jelenleg sokaktól elfogadott felfogás szerint a mozgástörvények, melyek az erős kölcsönhatásokban résztvevő részecskék („elemi” részek, rezonanciák) tömegét, töltését stb. megszabják. Gell—Mann és Ne’eman feltevése szerint az uralkodó kölcsönhatás invarianciát mutat az SU_3 csoporttal szemben. A tömeg minden értékéhez tartozik SU_3 -nak egy-egy ábrázolása, mely irreducibilis, hacsak a mozgástörvények nem mutatnak az SU_3 -nál is nagyobb csoporttal szemben szimmetriát. Az adott ábrázoláshoz tartozó részecskék száma egyenlő ezen ábrázolás fokával. Az uralkodó kölcsönhatáshoz járul egy perturbáció, mely SU_3 -mal szemben nem, csak annak SU_2 alcsoportjával szemben invariáns. A perturbáció bekapcsolása tömegfelhasadást eredményez; az elfajulás csak olyan részecskék esetében marad fenn, amelyek SU_2 ugyanazon irreducibilis ábrázolásához tartoznak. A bekapcsoláskor az SU_2 csoport különböző irreducibilis ábrázolásaihoz tartozó részecskék alkotta töltésmultiplettek, melyek eredetileg SU_3 egy irreducibilis ábrázolásának megfelelő elfajult szupermultipletet alkottak, különválnak.

Összhangot mutat pl. ezen elgondolásokkal a Ξ_1, Σ_1, Δ részecskeállapotok töltés- és tömegspektruma. Ezen állapotok rendre az alábbi töltés- és tömegértékekkel rendelkeznek:

				Tömeg (MeV)
Ξ_1^0	Ξ_1^-			1530
Σ_1^+	Σ_1^0	Σ_1^-		1385
Δ^{++}	Δ^+	Δ^0	Δ^-	1238

(27)

A (26) képlet és a hozzáfűzött megfontolások alapján kézenfekvő feltenni, hogy ezek a részecskeállapotok az SU_3 csoport $n=3$ -mal jellemzett, tízdimenziós ábrázolásához tartoznak. A térbeli harmonikus oszcillátorra vonatkozó fenti megfontolásokkal a (27) tömegértékek jó közelítésben ekvidisztans jellege is összhangban áll. A (27) „részecske-piramis” természetesen felülről lezárást kíván; ez a körülmény vezette Gell—Mannt az Ω -hiperon megjósolására, melyet a fenti megfontolásoknak jól megfelelő tömeggel (1685 MeV) valóban megfigyeltek.

Természetesen nem gondolunk arra komolyan, hogy a térbeli harmonikus oszcillátor kvantummechanikai sajátértékfeladatát az erős kölcsönhatásokban résztvevő részecskék valamiféle modelljének tekintsük. Az inkább arra szolgált, hogy az SU_3 csoportot egy jól ismert példa kapcsán bevezessük és tanulmányozzuk. Az $n=3$ -as ábrázolást az elmélet minden útmutatása nélkül, a kísérleti tények sugallatára ragadtuk ki; jelenleg nem ismerünk olyan részecskéket, amelyeknek az $n=1$ -gyel vagy 2-vel jellemzett ábrázolás felelne meg. Ugyanakkor fontos szerepe van az elemirészfizikában az SU_3 csoport nyolcdimenziós reguláris ábrázolásának, mely a térbeli izotróp harmonikus oszcillátor állapotterében, míg az egyrészecske-problémára szorítkozunk, nem lép fel. A következőkben ezzel az ábrázolással foglalkozunk.

Két részecskét veszünk szemügyre, melyek mozgásukat ua. térbeli izotróp harmonikus oszcillátor-potenciál hatása alatt végzik. A probléma ekvivalens a hatdimenziós izotróp harmonikus oszcillátoréval, melynek szimmetriacsoportja az SU_6 csoport. Ezen általánosabb szimmetriacsoportra most nem terjesztjük ki figyelmünket; ennek azon alcsoportjával foglalkozunk, mely a két részecske a_1, a_2, a_3 , ill. b_1, b_2, b_3 operátorait SU_3 mátrixaival transzformálja, ahol még feltesszük, hogy a b_r -ek transzformációs mátrixa az a_r -ekének komplex-konjugáltja.

$$\underline{a}' = \underline{U} \underline{a}, \quad (28)$$

$$\underline{b}' = \underline{U}^* \underline{b}. \quad (29)$$

Ezen transzformációk infinitezimális generátorai:

$$\mathcal{J}_{rs} = a_r^+ a_s - \frac{\delta_{rs}}{3} a^+ a - \left(b_s^+ b_r - \frac{\delta_{sr}}{3} b^+ b \right). \quad (30)$$

Valóban, vessük alá az $\underline{a}, \underline{b}$ operátorokat hasonlósági transzformációnak az

$$U = 1 - i\gamma_{rs} \mathcal{J}_{rs} \quad (\gamma_{rs} = \gamma_{sr}^*) \quad (31)$$

unitér operátor segítségével ($|\gamma_{rs}| \ll 1$):

$$U^+ \underline{a} U = (1 - i\gamma) \underline{a}, \quad (32)$$

$$U^+ \underline{b} U = (1 + i\gamma^*) \underline{b}; \quad (33)$$

megkaptuk a (28—29) transzformációs képleteket SU_3 -nak az egységelemtől elsőrendű kicsiny tagokban különböző $\underline{U} = 1 - i\gamma$ elemei esetére. Az $a_r^+ b_s^+ |0\rangle$ alakú kétrészecske-állapotok száma kilenc. Ezeknek egy lineáris kombinációja, az $a^+ b^+ |0\rangle$ állapot a (28—29) transzformációval szemben invariáns. Az $a_r^+ b_s^+ |0\rangle$ állapotok kifeszítette tér $\underline{a}^+ \underline{b}^+ |0\rangle$ -re ortogonális nyolcdimenziós alterét az

$$\left(a_r^+ b_s^+ - \frac{\delta_{rs}}{3} a^+ b^+ \right) |0\rangle \quad (34)$$

állapotok feszítik ki. Ebben az alterben az SU_3 csoport nyolcdimenziós irreducibilis ábrázolása: a reguláris ábrázolás valósul meg. (Könnyű meggyőződni róla, hogy a zérustól különböző súlyok megegyeznek SU_3 gyökeivel.) Osztályozzuk a (34) állapotokat (26) analógiájára, egy sorba írva azokat az állapotokat, melyek az a_1, a_2 , valamint b_1, b_2 operátorokat transzformáló SU_2 csoport ua. irreducibilis ábrázolásához tartoznak:

$$a_3^+ b_2^+ |0\rangle, \quad a_3^+ b_1^+ |0\rangle, \quad (35)$$

$$\left. \begin{aligned} a_1^+ b_2^+ |0\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ b_1^+ - a_2^+ b_2^+) |0\rangle, \quad a_2^+ b_1^+ |0\rangle, \\ \sqrt{\frac{3}{2}} \left(a_3^+ b_3^+ - \frac{1}{3} a^+ b^+ \right) |0\rangle, \end{aligned} \right\} \quad (36)$$

$$a_1^+ b_3^+ |0\rangle, \quad a_2^+ b_3^+ |0\rangle. \quad (37)$$

Ha a háromdimenziós harmonikus oszcillátor izotrópiáját egy $\alpha \mathcal{I}_{33}$ alakú perturbáció bekapcsolásával megsértjük, a (35), (36), (37) állapotok energiája rendre az $\alpha, 0, -\alpha$ értékkel változik meg. Ez a perturbáció nem választja szét az SU_2 csoport minden irreducibilis ábrázolását; a (36) alatt felírt állapotok, melyekhez egy három- és egy egydimenziós irreducibilis ábrázolás tartozik, továbbra is elfajultak. A $\alpha \mathcal{I}_{33}$

lineáris perturbáció mellé az xy -síkbeli izotrópiát ugyancsak megőrző $\frac{\beta}{2} (\mathcal{I}_{3r} \mathcal{I}_{r3} + \mathcal{I}_{r3} \mathcal{I}_{3r})$ kvadratikus tagot bevezetve, ez az elfajulás feloldódik. A perturbációszámítás első közelítésében a megfelelő energiakorrekciók rendre:

$$\alpha + \frac{5}{2} \beta, \quad (35')$$

$$3\beta, \quad (36')$$

$$\beta, \quad (37')$$

$$-\alpha + \frac{5}{2} \beta.$$

Az erős kölcsönhatásokban résztvevő részecskék közül a

$$\Xi^0 \quad \Xi^- \quad (35'')$$

$$\left. \begin{array}{ccc} \Sigma^+ & \Sigma^0 & \Sigma^- \\ & \Lambda^0 & \end{array} \right\} \quad (36'')$$

$$N^+ \quad N^0 \quad (37'')$$

barionok illenek bele az SU_3 csoport (35—37) nyolcdimenziós ábrázolásába. A tömegfelhasadásra elfogadva a (35'—37') képleteket, az N, Λ, Σ, Ξ barionok tömegeire az

$$\frac{M_N + M_\Xi}{2} = \frac{3M_\Lambda + M_\Sigma}{4} \quad (38)$$

összefüggés adódik. A (38) összefüggés Gell—Mann—Okubo tömegformula néven ismeretes. A kísérleti értékeket behelyettesítve, az kielégítően teljesül. Megjegyezzük, hogy a (26) tízdimenziós ábrázolás esetében az \mathcal{J} -ben kvadratikusan perturbáció bevezetése mellett is ekvidisztans a spektrum.

Mint Werner Heisenberg is megemlítette 1964-ben Budapesten tartott előadásában, a (38) tömegképlet nem csak a fenti, SU_3 -on alapuló modellből vezethető le. Valóban, megadható egy a fentiekből eltérő kétdimenziós oszcillátormodell, mely ugyancsak (38)-ra vezet. Transzformálódjanak $\underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$ és $\underline{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$ egyöntetűen SU_2 szerint. Szerkesszük meg a következő állapotokat:

$$\frac{1}{\sqrt{3}} (a_1^+ b_2^+ - a_2^+ b_1^+) b_1^+ |0\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} (a_1^+ b_2^+ - a_2^+ b_1^+) b_2^+ |0\rangle, \quad (35''')$$

$$\left. \begin{array}{l} a_1^+ b_1^+ |0\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ b_2^+ + a_2^+ b_1^+) |0\rangle, \quad a_2^+ b_2^+ |0\rangle, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (a_1^+ b_2^+ - a_2^+ b_1^+) |0\rangle, \end{array} \right\} \quad (36''')$$

$$a_1^+ |0\rangle, \quad a_2^+ |0\rangle. \quad (37''')$$

A

$$H' = A + B \underline{b}^+ \underline{b} + \frac{1}{2} C (\underline{a}^+ \hat{\sigma} \underline{a}) (\underline{b}^+ \hat{\sigma} \underline{b}) \quad (39)$$

SU_2 -invariáns operátor sajátértékei a (35'''—37''') állapotokban rendre:

$$A + 2B - 2C, \quad (35''''')$$

$$\left. \begin{array}{l} A + B + \frac{1}{2} C, \\ A + B - \frac{3}{2} C, \end{array} \right\} \quad (36''''')$$

$$A. \quad (37''''')$$

A $(35'''-37''')$ állapotokat azonosítva a $(35''-37'')$ barionokkal, a $(35'''-37''')$ energiaértékeket pedig tömegekkel, megkaphatjuk (38)-at. Lényegében ilyen módon vezette le a szerző a (38) tömegképletet 1959-ben a Nuclear Physicsben közölt dolgozatában (10. kötet, 197. old. Előadva az 1958. balatonvilágosi elemirész-fizikai kollokviumon).

Ami a fenti megfontolásokban szerepelt oszcillátorkvantumok fizikai jelentését illeti, az SU_3 -on alapuló modell esetében ezeknek az ún. quark-részecskék felelnének meg. A kétdimenziós oszcillátormodell b_r^+ operátorai Heisenberg spurionjának, ill. a Goldhaber által kezdeményezett és a szerző által tárgyalt modellben az antikaonnak felelnek meg. Érdeklődésre tart számot annak vizsgálata, hogy az alapfeltevések mely típusa az, mely (38)-at maga után vonja.

Az SU_3 csoportnak az atommag elméletében is jelentősége van. Egy térbeli izotróp harmonikus oszcillátor potenciálterében mozgó n -részecskerendszer hullámfüggvényeit SU_3 irreducibilis ábrázolásai szerint osztályozva az ún. kvadrupól-kölcsönhatást diagonalizáló függvényrendszerhez jutunk. Ily módon a magok forgási állapotainak mikroszkopikus leírása adható. Az SU_3 csoport ezen alkalmazásának jelentőségét az korlátozza, hogy az erős spin-pálya kölcsönhatás megsérti az SU_3 -invarianciát. Jelentős előrelépés volna egy olyan szimmetria felismerése, mely erős spin-pálya-kölcsönhatás jelenlétében az SU_3 -invariancia helyére lép.

3. Szupravezető típusú párkorreláció Hamilton-operátorának elfajulása az erős csatolás határesetében (Szimplektikus-invariáns sokfermion-feladatok)

Az elfajulás problémája és a Hamilton-operátor csoportelméleti szerkezetének ezzel összefüggő kérdése a több részecske-feladatok és a térelméletek esetében is fontos szerepet játszik. Kapcsolatosak ezzel azok a vizsgálatok, melyek célja: tisztázni a részecskeszám ingadozásának hatását a szupravezetés Bardeen—Cooper—Schrieffer-féle elméletében. Legyen H az adott több részecske-feladat (szupravezető, atommag) Hamilton-operátora. Lipkin mutatott rá arra, hogy ha sikerül olyan $f(N)$ függvényt találnunk, amellyel a

$$H' = H - f(N) \quad (1)$$

új Hamilton-operátort képezve, az az N részecskeszámban elfajult energiaspektrummal rendelkezik, úgy az (1) operátor határozatlan részecskeszámú sajátfüggvényeit, valamint a megfelelő sajátértékeket megkeresve, az eredeti H operátor sajátérték-spektruma is meghatározható. A gyakorlatban természetesen Lipkin észrevétele legtöbbször oly módon értékesíthető, hogy megkeressük az $f(N)$ függvény egy közelítését, amely mellett H' spektruma az N részecskeszámban közelítő elfajulást mutat; a sajátfüggvények meghatározása általában ugyancsak közelítő módszerrel történik (amilyen pl. a BCS módszer).

A BCS módszer, ill. a Bogoljubov—Valatin-transzformáció tanulmányozására igen alkalmas modell a szupravezető típusú párkorreláció Hamilton-operátora az erős csatolás határesetében, mely — mint azt Racah, Mottelson, Wada, Takano, Fukuda, Baumann, Eder, Thirring és Sexl munkáiból tudjuk — egzaktul megoldható. Az egzakt, valamint a Bogoljubov-transzformáció felhasználásával nyert

közelítő megoldások összehasonlításával Thirring és munkatársai foglalkoztak. Azt találták, hogy a modell egzakt alapállapota általában nem elfajult, a Bogoljubov-transzformáció segítségével elvégzett közelítés azonban elfajult alapállapotra vezet. Megállapították továbbá, hogy ha az egyrészecske-állapotok száma minden határon túl nő, az egzakt alapállapot elfajulttá válik. Olyan H' Hamilton-operátor megszerkesztésével, mely a részecskeszámban egzakt elfajulást mutat, Lipkin fent körvonalazott elgondolásaihoz kapcsolódva Nogami foglalkozott.

A szimplektikus-invariáns sokfermion-feladatok alább követendő rendszeres tárgyalása speciális esetként magában foglalja a Thirring és munkatársai, valamint a Nogami által tárgyalt modelleket és rávilágít azok csoportelméleti szerkezetére. Foglalkozunk azzal a kérdéssel, hogy mely esetben elégíthető ki a Hamilton-operátor sajátértékegyenlete egzaktul olyan sajátfüggvényekkel, amelyeket a kvázirészecskék számának meghatározott értékei jellemeznek.

Azonos $\frac{1}{2}$ spinű részecskék rendszerével foglalkozunk. Feltesszük, hogy az egyrészecske-állapotok tere véges dimenziós. Itt gondolhatunk a mag egy héjában helyet foglaló azonos nukleonokra, vagy a szupravezetés tárgyalására az erős csatolás határesetében, mikor is az impulzustér egy véges tartományába eső elektron-állapotok játszanak csupán szerepet. Az időtükrözéssel szemben mutatott invariancia követelményéből következik, hogy az egyrészecske-állapotok terének dimenziója páros: 2Ω ($\Omega = \text{egész}$).

Felhasználva a második kvantálás formalizmusát, a következőképpen adhatjuk meg az állapottér egy teljes alaprendszerét:

$$\begin{aligned}
 &|0\rangle, \\
 &a_{K_1}^+ |0\rangle, \\
 &a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ |0\rangle, \\
 &\dots \\
 &a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ \dots a_{K_{2\Omega}}^+ |0\rangle \\
 &(K_1 > K_2 > \dots > K_{2\Omega}).
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

Ha az a_K^+ részecske keltő operátorokat ($K = \Omega, \Omega - 1, \dots, -\Omega$) az $U_{2\Omega}$ unitér csoport transzformációinak vetjük alá, úgy az n -részecske állapotok tere az $U_{2\Omega}$ egy irreducibilis ábrázolása szerint önmagába transzformálódik. Ezen ábrázolás szokásos jele $[1^n]$. Az állapottér $n=0$ -hoz tartozó altere egydimenziós; a megfelelő alapvektor a $|0\rangle$ vákuum (zérus rendű tenzor vagy skalár). Az $n=1$ -hez tartozó alter az $U_{2\Omega}$ csoport vektor- vagy önábrázolása szerint transzformálódik. Az n -részecske állapotok úgy transzformálódnak, mint egy n -edrendű teljesen antiszimmetrikus tenzor komponensei.

Természetesen bármely Hamilton-operátor, mely a részecskeszám operátorával felcserélhető, ezen irreducibilis ábrázolási terek mindegyikét önmagába transzformálja. A diagonalizálás azonban általában csak numerikus úton lehetséges. Ezen a ponton csak annyit mondhatunk, hogy adott n mellett az energiamátrix sorainak és oszlopainak száma $\binom{2\Omega}{n}$, ami az n -részecske állapotok terének dimenziója.

A Hamilton-operátor invarianciatulajdonságai azonban, mint pl. a térbeli R_3 forgás-

csoporttal szemben mutatott invariancia, csökkentheti a diagonalizálandó mátrixok méreteit.

A célunk szimplektikus-invariáns sokrészecske-Hamilton-operátorok tanulmányozása. Ennek megfelelően az $U_{2\Omega}$ unitér csoport $USp_{2\Omega}$ unitér szimplektikus alcsoportját fogjuk felhasználni arra, hogy az állapotok osztályozását részletesebbé tegyük. Az $USp_{2\Omega}$ csoport az a_K^\pm részecske keltő operátorok azon unitér transzformációiból áll, amelyek változatlanul hagyják az

$$A^+ = \sum_{K>0} a_K^+ a_{-K}^+ = \frac{1}{2} \sum_{K \leq 0} \kappa_K a_K^+ a_{-K}^+ \left\{ \begin{array}{l} \kappa_K = \frac{K}{|K|} \end{array} \right\} \quad (3)$$

antiszimmetrikus bilineáris alakot. Az $U_{2\Omega}$ csoport $[1^n]$ irreducibilis ábrázolásának azon mátrixai, amelyek $USp_{2\Omega}$ elemeinek felelnek meg, általában reducibilis ábrázolását alkotják az utóbbi csoportnak. A kiredukálást elvégezve $USp_{2\Omega}$ következő irreducibilis ábrázolásai adódnak:

$$\begin{aligned} & (00 \dots 0) + (110 \dots 0) + (11110 \dots 0) + \dots + \left(\overset{1}{1} \overset{2}{1} \dots \overset{n}{1} 0 \dots 0 \right), \\ & (10 \dots 0) + (1110 \dots 0) + (111110 \dots 0) + \dots + \left(\overset{1}{1} \overset{2}{1} \dots \overset{n}{1} 0 \dots 0 \right), \\ & \text{ha } n \begin{cases} \text{páros,} \\ \text{páratlan.} \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

Itt a szokásos jelölést alkalmaztuk; az $USp_{2\Omega}$ csoport irreducibilis ábrázolásai Ω számú egész szám jellemzi; a (2) alatt felírt állapotok antiszimmetriája folytán csak az 1 és 0 értékek lépnek fel. Az egyesek számát egy (4) alatt szereplő tagban Racah nyomán szenioritásnak nevezzük. Az s szenioritás eszerint a következő értéket veszi fel:

$$s = \begin{cases} 0, 2, 4, \dots, n, \\ 1, 3, 5, \dots, n, \end{cases} \quad \text{ha } n \begin{cases} \text{páros,} \\ \text{páratlan,} \end{cases} \quad (5)$$

A kiredukálás ismételt spurképzés segítségével végezhető el, felhasználva azt a tényt, hogy A^+ , mely az $U_{2\Omega}$ csoporttal szemben másodrendű tenzorként viselkedik, skalárrá válik, ha $USp_{2\Omega}$ -ra szorítkozunk. A (4) képlet általános tagja egy s -edrendű spurtalan antiszimmetrikus tenzort képvisel. A kétrészecske-állapotok közül pl.

$$C_0 \sum_{K>0} a_K^+ a_{-K}^+ |0\rangle \quad (6)$$

invariáns skalár, mely a $(00 \dots 0)$ ábrázolásnak felel meg, míg a

$$C_2(K_1 K_2) \left(a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ - \frac{\delta_{K_1-K_2}}{\Omega} \sum_{K>0} a_K^+ a_{-K}^+ \right) |0\rangle \quad (7)$$

állapotok, melyek másodrendű spurtalan antiszimmetrikus tenzor komponenseit alkotják, az $s=2$ -höz tartozó $(110 \dots 0)$ irreducibilis ábrázolás terét feszítik ki (C_0 és C_2 normálási együtthatók).

Fontos körülmény, hogy a (4) felbontásban az $USp_{2\Omega}$ csoport adott (ekvivalencia erejéig meghatározott) irreducibilis ábrázolása legfeljebb egyszer lép fel. A Schur-féle lemma alapján levonhatjuk a következtetést: Az $USp_{2\Omega}$ csoportnak az n -részecske állapotok terében megvalósuló ábrázolását kiredukáló alarendszer automatikusan átlós alakra hoz bármely Hamilton-operátort, mely az $USp_{2\Omega}$ csoporttal szemben invariáns, és amely biztosítja a részecskeszám-megmaradást. Ilyen tulajdonságú Hamilton-operátorokat Casimir-operátorok segítségével szerkeszthetünk.

Vegyük szemügyre először az $U_{2\Omega}$ csoportot, mely magában foglalja $USp_{2\Omega}$ -t mint alcsoportot. Ez nem félegyszerű, de felírható két egyszerű csoport direkt szorzata alakjában: $U_{2\Omega} = U_1 \times SU_{2\Omega}$. A két direkt faktor, valamint $USp_{2\Omega}$ Casimir-operátorai — alkalmas normálás választása mellett — a következők:

$$G(U_1) = \frac{1}{4}N^2, \quad G(SU_{2\Omega}) = \frac{1}{4}N(N-2\Omega), \quad (8)$$

$$G(USp_{2\Omega}) = \frac{1}{4}N(N-2\Omega-2) + A^+A. \quad (9)$$

Az utóbbinak más alkalmasabb alak is adható, felhasználva az ún. kvázispin fogalmát. Az $\tilde{S}(S_1, S_2, S_3)$ kvázispin-operátor komponenseit a következő képletek értelmezik:

$$S_1 = \frac{1}{2}(A + A^+), \quad S_2 = \frac{1}{2i}(A - A^+), \quad S_3 = \frac{1}{2}(\Omega - N). \quad (10)$$

Ezen három komponens a három független bilineáris unitér-szimplektikus invariáns. Ezek alarendszerét képezik az $r=1$ rangú Lie-algebrának (az R_3 vagy SU_2 csoport Lie-algebrájának). Kapjuk:

$$G(USp_{2\Omega}) = \tilde{S}^2 - \frac{1}{2}\Omega(\frac{1}{2}\Omega + 1). \quad (11)$$

A fentiekben leírt alarendszerben átlós alakot ölt a (8—9) Casimir-operátorok bármely

$$\mathcal{H} = \alpha G(U_1) + \beta G(SU_{2\Omega}) + \gamma G(USp_{2\Omega}) \quad (12)$$

lineáris kombinációja.

A csoportelmélet ezen Casimir-operátorok, és így a \mathcal{H} általános szimplektikus-invariáns Hamilton-operátor sajátértékeit is megadja. Az

$$\alpha = -\frac{g}{\Omega}, \quad \beta = g \frac{\Omega+1}{\Omega}, \quad \gamma = -g \quad (13)$$

választás mellett (12) átmegy a Thirring és munkatársai, valamint Mottelson és mások által vizsgált erős csatolású Hamilton-operátorba. Olyan Hamilton-operátort, amelynek spektruma a részecskeszámokban elfajult, $G(U_1)$ és $G(SU_{2\Omega})$ elhagyásával nyerünk. Ekkor tehát az $\alpha=\beta=0$ értékek választandók; így módon a párkorreláció Nogami által módosított Hamilton-operátort nyerjük.

A (11) képlet közvetlenül mutatja, hogy ez a Hamilton-operátor invariáns egy új szimmetriacsoporttal szemben, melyet a kvázispin \tilde{S} operátora generál. A „kvázispin-tér elforgatásai”, melyeket az $U = \exp(-i\alpha\tilde{n}\tilde{S})$ unitér operátor ír le ($\tilde{n}^2=1$), komplex Bogoljubov—Valatin transzformációk:

$$\left. \begin{aligned} a'_K &\equiv U^{-1}a_KU = ua_K - va_K^+, \\ a_{-K} &\equiv U^{-1}a_{-K}U = ua_{-K} + va_K^+, \end{aligned} \right\} \quad (K > 0) \quad (14)$$

ahol $u = \cos \frac{1}{2} \alpha - i n_3 \sin \frac{1}{2} \alpha$, $v = i(n_1 - i n_2) \sin \frac{1}{2} \alpha$. Ezen új szimmetriatulajdonságból következik, hogy a részecskék és a (rögzített $\vec{\alpha} = \alpha \vec{n}$ -hez tartozó) kvázirészecskék teljesen szimmetrikus szerepet játszanak. Így megszerkeszthető a Hamilton-operátor sajátállapotainak egy teljes rendszere, amely sajátállapotokat a kvázirészecske-szám meghatározott értékei jellemeznek. Ezen állapotok a BCS állapotok természetes általánosításának tekinthetők. Pontosan úgy kell eljárunk, amint azt a (4–7) képletekhez fűzött megfontolások során tettük, csupán a „részecske” szót kell a „kvázirészecske” szóval helyettesítenünk. Minden sajátértékhez hozzátartozik a kvázispintérbeli forgáscsoport és az $USp_{2\Omega}$ csoport direkt szorzatának egy-egy irreducibilis ábrázolása.

IRODALOM

1. H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1931.
2. E. P. Wigner, Group Theory and its Applications . . . , New York, 1959.
3. B. L. van der Waerden, Die Gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik, Berlin, 1932.
4. J. M. Jauch, E. L. Hill, Phys. Rev. 57, 641, 1940.
5. E. T. Whittaker, Analytical Dynamics, Cambridge Press.
6. J. Schwinger, On Angular Momentum, NYO 3071.
7. Ju. N. Demkov, Vesztn. LGU 11, 127, 1953.
8. G. A. Baker, Phys. Rev. 103, 1119, 1956.
9. Sz. P. Allilujev, ZsETF 33, 200, 1958.
10. V. A. Fock, ZS. f. Phys. 98, 145, 1935.
11. W. Pauli, ZS. f. Phys. 36, 336, 1926.
12. L. Hulthén, ZS. f. Phys. 86, 21, 1933.
13. V. Bargmann, ZS. f. Phys. 99, 578, 1936.
14. R. Loudon, Am. J. Phys. 27, 649, 1959.
15. F. Hund, ZS. f. Phys. 51, 11, 1928.
16. Elementarnie csasztici i kompenszirujuscie polja, Moszkva, 1964.
17. D. J. Thouless, The quantum mechanics of many-body systems, New York, 6. fejr.
18. B. R. Mottelson, The many body problem, Paris, 283. old.
19. K. Baumann, G. Eder, R. Sexl, W. Thirring, Ann. Phys. 16, 14, 1961.
20. H. J. Lipkin, Ann. Phys. 9, 272, 1960.
21. Y. Nogami, Progr. Theor. Phys. Japan 29, 938, 1963.
22. G. Györgyi, ZsETF 32, 159, 1957.
23. G. Györgyi, Nucl. Phys. 10, 197, 1959.
24. G. Györgyi, J. Révai, Phys. Lett. 11, 49, 1964.
25. Györgyi G. Fizikai Szemle 15, 3. sz. 1965.
26. G. Györgyi, J. Révai, ZsETF 48, 1445, 1965.

A REKOMBINÁCIÓ ÉS A GENERÁCIÓ-REKOMBINÁCIÓ ZAJ IRREVERZIBILIS TERMODINAMIKAI ELMÉLETÉRŐL FÉLVEZETŐKBEN*

PATAKI GYÖRGY

MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézet, Budapest

1. Bevezetés

A félvezetőkben vizsgált fizikai jelenségek jelentős részénél fellépnek olyan, ún. nem-egyensúlyi állapotok, amelyekben a töltéshordozók koncentrációja az egyes energia nivókon nem határozható meg a termodinamikai egyensúlyban érvényes eloszlásokból, s melyek a külső zavar megszűnte után a rendszer anyagi tulajdonságától és a külső feltételektől meghatározva idővel megszűnnek, azaz visszaáll a termodinamikai egyensúly.

Nemcsak elvi érdekessége van annak a kérdésnek, vajon milyen lesz nem-egyensúlyban a betöltöttség és mi lesz a nem-egyensúlyi állapot, a nem-egyensúlyi töltéshordozók élettartama. A félvezetős eszközök jelentős részében ezzel a kérdéssel, mint az illető eszköz jóságát meghatározó körülménnyel találkozunk. Elég, ha a tranzistorok felületi rekombinációs tulajdonságait említjük. De jól ismert tény az is, hogy a legegyszerűbb félvezetős eszköznek, a diódának telítési áramát a töltéshordozók τ_n , illetve τ_p élettartama jelentősen befolyásolja. Ezek ismerete, elvi és technológiai kézbentartása, tehát mindenképpen szükséges. Másrészt, nem-egyensúlyban olyan jól ismert összefüggések, mint $n_0 p_0 = n_i^2$ érvényét veszítik, azaz $np \neq n_i^2$. Kérdés, hogy miképp lehet ezeket a mennyiségeket meghatározni nem-egyensúlyban.

A különböző nivók betöltöttsége dinamikus jelenség. A termodinamikai egyensúly megengedi az átlagértékek körüli ingadozásokat. Ezek az ingadozások találhatóan a generáció-rekombináció zaj elnevezést kapták, vagy röviden $g-r$ zaj. Megjegyezzük, hogy a félvezetős eszközöknél a $p-n$ átmenetek zaja nagyobb, mint az alapanyag $g-r$ zaja, ezért a fenti zaj az alapanyagoknál jelentős.

Látszólag két különböző jelenségről kell számot adni. Azonban a rekombináció és a zaj szervesen kapcsolódnak egymáshoz. Ezt a belső kapcsolatot az irreverzibilis termodinamika segítségével lehet felhasználni egy egységes tárgyalás érdekében. Ehhez a vizsgált rendszer teljes termodinamikai leírása szükséges. Ezen azt értjük, hogy a g entrópia-mátrixon kívül a folyamatokra jellemző L vezetési mátrixot vagy a g és L -ből származtatható $A \equiv Lg$ ún. élettartam-mátrixot is meg kell adni. Ezek ismeretében a fluktuációk spektrális eloszlása is meghatározható a nevezetes Green—Callen disszipációs fluktuációs tétel segítségével, mely szerint az α extenzív mennyiség (α -oszlopvektor) $G(\alpha, f)$ spektruma $\omega^2 G(\alpha, f) = 4kT \operatorname{Re} Y(\omega)$ alakban írható ($\omega = 2\pi f$), ahol az $Y(\omega)$ admittancia mátrix pl. az L és g ismeretében $Y(\omega) = \frac{1}{T} \left(L^{-1} + \frac{g}{i\omega} \right)^{-1}$ alakban írható fel.

* A szerző azonos című disszertációja alapján.

Azt, hogy adott problémánál a teljes termodinamikai leírást nyújtó mátrixok közül (g , L , A) melyik kettőt adjuk meg, gyakorlati szempontok irányítják. A rekombináció és $g-r$ zaj esetében a g és A megadása egyszerűbb. Az A mátrix megadásához konkrét rekombinációs modell feltételezése szükséges, amely ismerete a rekombináció leírásához, az élettartamok megadásához valójában elegendő. Éppen az a tény, hogy a rekombináció, ellentétben a $g-r$ zajjal, közvetlenül tárgyalható az A mátrix ismeretében, továbbá az a körülmény, hogy a félvezető kutatásban az élettartam-mérés ma már rutinmérésnek számít, míg a $g-r$ zaj mérés szigorúbb kísérleti technikát igényel, a jelen dolgozat olyan felépítéséhez vezetett, hogy a rekombinációs modellt, a rekombinációs egyenleteket előre vesszük és csak a későbbiekben térünk ki a termodinamikai leírásra és a $g-r$ zaj tárgyalására. Ezzel a dolgozat rekombinációra vonatkozó része könnyen hozzáférhető azok számára is, akik a termodinamikai módszerektől idegenkednek. A dolgozat ennek megfelelően az alábbi kérdésekkel foglalkozik:

A 2. pontban röviden összefoglaljuk a rekombináció elméletének idáig kidolgozott fontosabb modelljeit, különös tekintettel a rekombinációs centrumokon keresztül végbemenő rekombinációs modellekre. Mint már említettük, a modell kiválasztása egyben a $g-r$ zaj jellegét is meghatározza.

A 3. pont a dolgozatban tárgyalt rekombinációs modell leírását tartalmazza. Ennek lényege, hogy a rekombináció a több elektron befogására képes centrum gerjesztett nivóin keresztül megy végbe. A gerjesztett nivók feltételezése *M. Lax*-tól ered és *A. V. Ryzanov*, *Yu. Gulyaev* és *M. Nagae* munkáiban stacioner esetben kerültek tárgyalásra.

A 4. pontban az A mátrix meghatározása céljából megadjuk a rekombinációt leíró differenciálegyenlet-rendszert. A kapott egyenletek a rekombinációs centrumok tetszőleges koncentrációja és tetszőleges gerjesztés mellett érvényesek. Megjegyezzük, hogy az A mátrix explicit megadása a kapott egyenletrendszer alapján elvégezhető, azonban az általános formulák túlságosan bonyolultakká válnak, így attól eltekintünk. Az A explicit megadására csak az alkalmazásnál kerül sor. A tárgyalásnál végig térfigatati rekombinációról beszélünk, azonban a felületi rekombinációra való általánosítás nem jelent elvi nehézséget.

Az 5. pontban ismertetjük az irreverzibilis termodinamika általunk használt módszerét. Ezen belül tárgyaljuk az ún. spontán és kényszerfolyamatok időbeli leírását homogén egységek esetén. Az ún. kényszerfolyamatok segítségével meg lehet határozni a termodinamikai folyamatok időbeli lefutását az α extenzív mennyiségek tetszőleges $G(t)$ generációja mellett. Ezzel az egyensúlyhoz való tartáson túlmenően, melyet Fényes I. adott meg először, a stacioner állapot beállása is tárgyalható.

A 6. pont rövid ismertetést tartalmaz a fluktuációk irreverzibilis termodinamikai elméletéről. Idézzük, levezetéssel együtt, az irodalomban Green—Callen disszipációs fluktuációs theoremmának nevezett összefüggést, amely, mint említettük, lehetőséget ad a $g-r$ zaj spektrális eloszlásának meghatározására.

A 7. pontban röviden ismertetjük a rekombináció és $g-r$ zaj irreverzibilis termodinamikai elmélete terén más kutatók által elért eredményeket és néhány kritikai megjegyzést teszünk *D. A. Evans* és *P. T. Landsberg* vonatkozó munkáival kapcsolatban.

A 8. pont a nem-egyensúlyi betöltöttséggel foglalkozik. Az ún. nagy-kanonikus eloszlás, vagy másképpen „trapping statistics” segítségével meg lehet kapni a különböző nivók $p_{s0}^{(j)}$ betöltöttségét egyensúlyban, mint az $E_s^{(j)}$ nivók és F_0 egyensúlyi

Fermi-nívó (kémiai potenciál) függvénye. Nem-egyensúlyban ezt úgy általánosíthatjuk, hogy az egyes nívókhöz saját $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi-nívót rendelünk. Ezzel a különböző (s, j) állapotú centrumokat különböző kémiai komponenseknek tekintjük. A nagy kanonikus sokaság ilyen irányú általánosítása tudomásunk szerint eddig nem történt meg.

A 9. pontban az előző pont eredményeire támaszkodva meghatározzuk a vizsgált rendszer $s(n \dots n_s^{(j)} \dots p)$ entrópiáját nem egyensúlyban, az extenzív mennyiségek függvényeként, nem elfajult sávok esetén. Ennek alapján a g entrópia-mátrixot *explicit*e megadjuk. Itt lényeges körülmény, hogy figyelembe kell venni a 4. pontban felírt mellékfeltételeket: a normálási feltételt és az elektromos semlegesség feltételét. Az általános termodinamikai erőket meghatározzuk a kvázi Fermi-nívók segítségével.

A 10. pontban két, a gyakorlat részére is érdekes esetben mutatjuk be az általános tárgyalás alkalmazását.

A 10a-ban *Rzsanov* modelljét vizsgáljuk, amelyben a centrumoknak két töltésállapotuk és mindegyik töltésállapotban egy-egy gerjesztett nívójuk van. Közelítőleg megadjuk a fenti modell mind a négy élettartamát és néhány következtetést vonunk le a rekombináció elemi aktusainak kvantummechanikai tárgyalására, valamint a belső átmenetek és a sávból való befogás paramétereinek szétválasztására vonatkozóan. *Explicit*e megadjuk a $g-r$ zaj spektrális eloszlás-mátrixát, a mátrix-függvények kanonikus felbontása segítségével.

A külső generációk figyelembevételének illusztrálására a 10b-ben stationer állapot környezetében vizsgáljuk a *Shockley—Read* modellt. A kapott eredmények azt mutatják, hogy bizonyos feltételek teljesülése esetén lehetőség van az egyes élettartamok szétválasztására.

A 11. pont a dolgozatban kapott eredmények diszkusszióját tartalmazza és röviden utal a további vizsgálatok lehetséges irányára.

Végül a Függelékben két kérdéssel foglalkozunk. Ismertetjük a mátrix-függvények kanonikus előállítására vonatkozó tételt, mely számos mátrixokra vonatkozó összefüggés bizonyításánál alkalmazható. Másrészt a *Green—Callen* disszipációs fluktuációs theoremaának több változóra vonatkozó levezetését adjuk, kiindulva *K. M. van Vliet* egyváltozós tárgyalásából. A mátrix-függvények kanonikus előállításának felhasználásával a zaj frekvencia függése főtengeley-transzformáció nélkül megállapítható.

2. A rekombináció elmélete félvezetőkben

A bevezetőben említettük, hogy a nem-egyensúlyi töltéshordozók élettartamának meghatározása a domináló rekombinációs mechanizmus felderítése (a vizsgálandó anyagban és általában) fontos szerepet kapott a félvezető kutatásban. Azok a próbálkozások, amelyek pl. *Ge* és *Si*-nél (a nem túlságosan kis tilos-sávú félvezetők esetében) közvetlen rekombinációs mechanizmust tételeztek fel, nem tudták még kvalitatíve sem helyesen értelmezni a rekombináció jelenségét. Ezért igen nagy jelentőségű volt *Shockley* és *Read* [1], illetve *R. N. Hall* [2] dolgozata, akik feltették, hogy a rekombináció a tilos-sávban elhelyezkedő ún. rekombinációs centrumokon keresztül megy végbe. A keskeny tilos-sávú félvezetőkben természetesen a közvetlen rekombinációnak, a sugárzásos rekombinációnak is fontos szerepe van. Ennek elméletét *W. von Roosbroeck* és *W. Shockley* [3] dolgozták ki. Jelen dolgozatban a rekombiná-

ciós centrumokkal foglalkozó vonalat vizsgáljuk és követjük végig, mivel ez végül is a legalapvetőbb rekombinációs mechanizmusnak mutatkozott a legkülönbözőbb félvezetős anyagokban. A kísérleti eredmények hamarosan igazolták az $S-R-H$ modell alapvető eredményeit [4], [5], [6], [7]. Meg lehetett állapítani a rekombinációs centrumok jellemző paramétereit: az N_t koncentrációt, E_t energia nivót C_n , C_p befogási paramétereket. Az élettartamok hőmérséklet függése és a gerjesztéstől való függése, lényegében helyesen adódott ki.

A továbbiak során azonban a kísérleti eredmények azt mutatták, hogy az egyszerű $S-R$ modell már nem elegendő. S itt nem egyszerűen arról volt szó, hogy több $S-R$ centrum működik egyidejűleg (ezzel az esettel foglalkoznak pl. [8], [9] dolgozatokban), hanem kiderült, hogy számos rekombinációs centrumként működő szennyezés, pl. arany, ezüst, tellur stb. több nívóval rendelkezhet, amelyekben a centrum különböző s töltésállapotban van. Ezt igazoló kísérleti eredményeket kaptak többek között *H. H. Woodbury* és *W. W. Tylor* [10], *C. B. Collins* [11] és még több szerző.

A különböző töltésállapotok betöltöttségének meghatározása egyrészt *W. Shockley* és *J. T. Last* [12], másrészt *P. T. Landsberg* [13], [14] nevéhez fűződik. Míg a Shockley—Last dolgozatban a vizsgált rendszer entrópiájának szélső értékéből határozza meg a különböző töltésállapotok betöltöttségét, Landsberg az ún. nagykanonikus eloszlás alkalmazásával (ezt ő utána „trapping statistics”-nek nevezzük) közvetlenül megkapja a kívánt eredményt. Jelen munkában az utóbbi módszert fogjuk előnybe részesíteni. Ezzel a kérdéssel részletesebben a 6. pontban fogunk foglalkozni. A stacioner élettartamot a fenti modellben *Chin-Tang Sah* és *W. Shockley* [15] adták meg. Meg kell jegyezni, hogy ez a fajta tárgyalás nem terjedt el, mivel igen nehézkes jelöléseket használ. A fenti modell, mely önmagában is elég bonyolult, mégis további kiegészítésre szorult. Ennek oka akkor lesz nyilvánvaló, ha feltesszük a kérdést: milyen konkrét mechanizmuson keresztül veszti el a rekombinálódó elektron az energiáját. A sugárzásos átmenet valószínűsége a nagy tilos-sávú félvezetőkben igen kicsi. Az ún. Auger-effektus feltételezése szerint [16] a rekombinálódó elektron a vezetési-sáv elektronjával ütközve veszti el az energiáját. Ez a mechanizmus azonban *nem* vezet a befogási paraméterek *helyes* nagyságrendjéhez. Az a természetesnek látszó feltevés, hogy a rekombinálódó elektron egyetlen fonon gerjesztésével veszti el energiáját nem tartható fenn, hiszen a centrum energiaszintje (vezetési sávtól mérve) pl. 0,20 eV, ugyanakkor a fononok átlagos energiája szobahőmérsékleten 0,026 eV. Már pedig a több fononos gerjesztésnek igen kicsi a valószínűsége [17]. Végül is a fenti nehézségből a kiutat úgylátszik *M. Lax* [18] és követői [18a], [18b], mutatták meg helyesen. *Lax* feltételezte, hogy a rekombináció elemi aktusánál az elektron nem a centrum alapállapotába hullik, hanem *feltételezve kellő számú* (tehát sűrűn fekvő) gerjesztett nivót, azon keresztül jut az alapállapotba. Hasonlóan a lyukbefogásra. A fenti megoldás azonban egyáltalán nem problémamentes. A kellő számú nívó létezése (azaz olyan sűrűn elhelyezkedő nívók, hogy a közöttük levő energiakülönbség kisebb legyen az adott hőmérsékleten az átlagos fononenergiánál) egyáltalán nem magától értődik, sőt *V. L. Boncs-Bruевичs* és *V. B. Glasko* [19] megmutatták, hogy nincs is mindig meg. Minden esetre ez az első elmélet, amely a befogási állandókat *helyes* nagyságrendben adta meg. Ezek után nyilvánvaló, hogy a rekombináció $S-R$ elméletét igyekezzek úgy általánosítani, hogy a gerjesztett nivókat is figyelembe vegyék. Ezen a téren meg kell említeni *Yu. Gulyaev* [20], *A. V. Rzsanov* [21] és *M. Nagae* [22] munkáit.

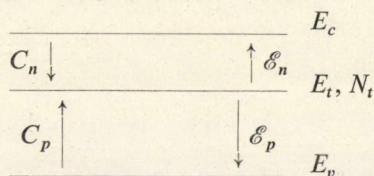
Gulyaev megmutatta, hogy a gerjesztett nívók figyelembevétele a befogási keresztmetszetek exponenciális hőmérséklet függéséhez vezethet. Rzsanov abból a konkrét modellből indult ki, hogy a rekombinációs centrumnak két töltésállapota és mindegyik töltésállapotban egy-egy gerjesztett nívója van. Megadta a *stationer* élettartamot az új modellben. Általánosabb esettel foglalkozik, de ismét *csak stationer* feltételek mellett Nagae, aki a centrumoknak különböző $[s, j]$ állapotot enged meg (s a töltésállapot, j a gerjesztési nívó indexe). Speciális esetként visszkapja Rzsanov eredményeit. Mindezekkel a későbbiekben részletesen fogunk foglalkozni. Az előzőekben többször hangsúlyoztuk, hogy a rekombinációval foglalkozó idézett dolgozatokban a szerzők az ún. *stationer* élettartammal foglalkoztak. Fizikailag ez annyit jelent, hogy eltekintenek attól a rövid tranzienstől, amely alatt a centrumok „feltöltődnek”. Ennek meghatározása csak úgy lehetséges, ha felírjuk az adott modellt leíró teljes differenciálegyenlet-rendszert és meghatározzuk a karakterisztikus egyenlet gyökeit (a már linearizált egyenletről szólva). Ezen a téren az eredeti $S-R$ modell tranzienst élettartamát D. J. Sandiford [23] adta meg, több centrum és az ún. trappek hatásával G. K. Wertheim [24] foglalkozott, míg a gerjesztett nívók egyszerűbb, Rzsanov-féle modelljében, a [25]-ben adtuk meg a tranzienst élettartamot. Jelen munka 3. pontjában az $[s, j]$ állapotokon keresztül végbemenő rekombináció differenciálegyenlet-rendszerét adjuk meg, az irodalomban először. Az Alkalmazások pontban közelítőleg megadjuk a Rzsanov-modellnek mind a négy élettartamát. Ebben a rövid irodalmi összefoglalóban nem nyílik lehetőség az egyes dolgozatok részletes elemzésére. Célszerűnek látszik azonban, hogy az eredeti $S-R-H$ modell gondolatmenetét az irodalomban azóta szokásossá vált módon ismertessük. Az itt közölt tárgyalás abban különbözik az eredetitől, hogy eleve energiától független befogási paramétereket vezet be. Az eredeti dolgozat alapján ez teljesen indokolt.

Tekintsük egy nem elfajult félvezetőt, amelyben a teljesen ionizált donorok koncentrációja N_d , a teljesen ionizált akceptorok koncentrációja N_a , a vezetési-sáv elektronjainak koncentrációja n_0 a valencia-sáv lyukainak koncentrációja p_0 . Az n_0 és p_0 az egyensúlyi F_0 Fermi nívóval a következőképpen határozhatók meg:

$$n_0 = N_c e^{-\frac{E_c - F_0}{kT}}, \quad p_0 = N_v e^{-\frac{F_0 - E_v}{kT}}. \quad (1)$$

Ezekre tehát igaz, hogy $n_0 p_0 = n_i^2$ az F_0 -tól függetlenül $\left(n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{\Delta E}{2kT}} \right)$, ahol $N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2}$, $N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2}$, $\Delta E \equiv E_c - E_v$ a tilos-sáv szélessége).

Az N_c , N_v -t szokásos effektív állapotsűrűségnek nevezni. A rekombinációt a N_t koncentrációjú, E_t energia nívójú centrum közvetíti. Az 1. ábrán láthatók azok az átmenetek, amelyek meghatározzák a rekombinációt.



1. ábra. A S-R-H-modell.

Feltesszük, hogy a centrum betöltetlen állapotban semleges és így egy elektront befogva egyszerűen lesz negatívan töltve. A semleges állapotban levő centrumok koncentrációját p_t -vel, a töltöttekét n_t -vel jelölve nyilván

$$n_t + p_t = N_t \quad (2)$$

Ezen koncentrációk egyensúlyban felvett értékeit jelöljük n_{t0} , p_{t0} -val.

A továbbiakban az ún. tiszta befogási sebességeket határozzuk meg.

A vezetési-sávból a centrumok egységnyi idő alatt egyrészt befognak

$$C_n p_t n$$

elektront, másrészt emittálnak

$$\mathcal{E}_n n_t$$

elektront. Ez tisztán

$$U_n = C_n n p_t - \mathcal{E}_n n_t \quad (3)$$

tiszta befogási sebességet jelent. Itt és a továbbiakban igen lényeges, hogy C_n és \mathcal{E}_n -t konstansnak tekintjük, azaz nem függ (legalábbis az egyensúlyhoz elég közel) a koncentrációktól. Ez azt jelenti, hogy a köztük levő összefüggést az egyensúlyból határozhatjuk meg. Nyilván termikus egyensúlyban $U_n = 0$, azaz az ún. „részleges egyensúly” elve adja:

$$C_n n_0 p_{t0} - \mathcal{E}_n n_{t0} = 0 \quad (4)$$

Innen pl. \mathcal{E}_n kifejezhető és kapjuk:

$$U_n = C_n \left(n p_t - n_0 \frac{p_{t0}}{n_{t0}} \right) \equiv C_n (n p_t - n_1 n_t) \quad (5)$$

Az $n_1 \equiv n_0 \frac{p_{t0}}{n_{t0}}$, amint egyszerű belátni, az a vezetési-sávbeli elektronkoncentráció, mely akkor áll elő, ha a Fermi nívó az E_t nívóra esik. Valóban, a Fermi eloszlásból

$$n_{t0} = \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)}; \quad p_{t0} = \frac{N_t \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)} \quad (6)$$

és így (1)-et felhasználva:

$$n_1 \equiv n_0 \frac{p_{t0}}{n_{t0}} = N_c e^{-\frac{E_c - F_0}{kT}} \cdot e^{\frac{E_t - F_0}{kT}} = N_c e^{-\frac{E_c - E_t}{kT}}$$

Vagyis valóban $F_0 = E_t$ esetben kapunk ilyen koncentrációt a vezetési-sávban.

Teljesen hasonlóan járhatunk el a valencia-sávra vonatkozóan is. A tiszta lyukbefogás U_p sebességét a következőképpen írhatjuk:

$$U_p = C_p (p n_t - p_1 p_t) \quad (7)$$

ahol most $p_1 \equiv p_0 \frac{n_{t0}}{p_{t0}}$. Mint könnyen látható érvényes, hogy $n_1 p_1 = n_t^2$.

Az (5) és (7) egyenletekben n , p , n_t , p_t koncentrációk szerepelnek. Ha a tiszta befogási sebességeket n és p segítségével akarjuk kifejezni (ezek kapcsolatosak

jól mérhető mennyiségekkel), akkor még további két egyenlet szükséges. Az első a (2) egyenlet lehet, a másik, ahogy pl. az eredeti $S-R$ dolgozatban volt tárgyalva a stacioneritás feltétele, vagyis az $U_n = U_p = U$ egyenlet. Így n_t és p_t eliminálható. Az élettartam definícióját Shockley és Read a következőképpen adták meg stacioner esetre, kis N_t -kre:

$$\tau \equiv \frac{\Delta n}{U} \quad (8)$$

ahol $\Delta n \equiv n - n_0$ ($\Delta n \equiv \Delta p$).

Egyszerű számítás adja a stacioner befogási sebességeket:

$$U = \frac{N_t C_n C_p (np - n_1 p_1)}{C_n (n + n_1) + C_p (p + p_1)} \quad (9)$$

Kis Δn -nél megkaphatjuk az $S-R$ modell egyik alapvető eredményét, az élettartamot, mint az n_0, p_0, N_t koncentrációk, az n_1, p_1 (lényegében az E_t), és a befogási paraméterek C_n, C_p függvényében:

$$\tau = \frac{C_n (n_0 + n_1) + C_p (p_0 + p_1)}{N_t C_n C_p (n_0 + p_0)} \quad (10)$$

Nyilván, hogy az $U_n = U_p$ nem lesz igaz a rekombináció egész menetén, különösen a kezdeti tranziens szakaszon, amikor a centrumok kezdenek feltöltődni. A stacioner élettartam (8)-beli definíciója jó érzékkel megfogott mennyiség, de nem korrekt. A helyes tárgyalási módot Sandiford adta az $S-R$ modellre, aki elsőnek mutatott rá arra, hogy az U_n, U_p -k segítségével fel kell írni az n és p -re vonatkozó differenciálegyenlet-rendszert és a hiányzó egyenletet az elektromos semlegesség feltétele nyújtja, azaz

$$n + n_t + N_a = p + N_d \quad (11)$$

ahol a bal oldalt a negatív, jobb oldalt a pozitív töltéseknek megfelelő koncentrációk állnak. A p_t nem szerepel az egyenletben, mivel feltettük, hogy a centrum az elektron befogása előtt semleges.

A probléma megoldása így a differenciálegyenlet-rendszer megoldására lett visszavezetve, hiszen a rekombináció időfüggését az $n(t), p(t)$ megoldások adják, ahonnan például az egyensúlytól közeli esetekben mind a (10)-nek megfelelő stacioner, mind az ún. tranziens élettartam meghatározható. Ez utóbbi a fenti egyszerű esetben a következő lesz:

$$\tau_t = \frac{1}{C_n (n_0 + n_1) + C_p (p_0 + p_1)} \quad (12)$$

Itt kell megemlíteni, hogy a Shockley által adott definíció a stacioner élettartamra a rekombinációt leíró differenciálegyenlet karakterisztikus egyenletének gyökéből kapható közelítésként és ugyanilyen közelítésben van a (12) is meghatározva. A legújabb irodalomban további kísérletek találhatók különböző rekombinációs modellek megkonstruálására. Ezek közül egyet említenénk, melyet Seinkman 1963-ban közölt. A szerző felteszi, hogy a centrumba hulló lyuk egy vagy két elektront lök ki a centrumból, ha a centrumban levő elektronoknak elegendő nagy a kölcsönhatási energiája. Pontosabban olyan félvezetőt tekint, melyben pl. megvilágítás esetén a centrumok be vannak töltve elektronokkal (a félvezető maga legyen n típusú). A centrum egy lyuk befogásakor a vezetési-sávban emittál egy,

vagy két elektront. Ezzel a *kisebbségi* töltéshordozók befogásánál felmerülő energia-disszipáció problémát valóban megoldja. Persze az elektronokra vonatkozóan a probléma nyitva marad. Az általa javasolt mechanizmusnak tudomásunk szerint nincs közvetlen bizonyítéka, de az elemi rekombinációs aktusok kvantummechanikai tárgyalásánál ezt a lehetőséget is célszerű figyelembe venni; meg kell vizsgálni a centrumban levő elektronok kölcsönhatásának nagyságrendjét. Említettük, hogy lehetséges több *egyszerű* $S-R$ centrum (két töltésállapot, gerjesztett nívó nélkül) is a félvezetőkben, sőt olyan kísérletek is vannak, amelyek folytonosan eloszlott centrumokat tételeznek fel. [43]. Több $S-R$ centrum esetén a tranzien্স élettartamot *G. K. Wertheim* [24] tárgyalta. Itt többek között a következő kérdéseket érinti:

- a) rekombináció egy, vagy két Shockley—Read típusú centrum esetén;
- b) rekombinációs centrum „trap” jelenlétében.

Ez utóbbival kapcsolatban a „trap” elnevezésről szeretnénk néhány megjegyzést tenni. Az eredeti $S-R$ dolgozatban a rekombinációt közvetítő centrum még „trap” elnevezéssel szerepelt, később világos lett, hogy ez félre érthető, hiszen egy „csapda” inkább megfogja az elektront, mintsem közvetíti. Ezért a későbbiekben ezek a centrumok a *rekombinációs centrum* elnevezést kapták.

A több töltésállapottal rendelkező centrumok kísérleti kimutatása és elméleti vizsgálata után a rekombinációs centrumok a „flaw” (rés, hasadék) elnevezést kapták és a trap valóban a csapdának maradt meg. Ez utóbbit a szovjet irodalom „uroveny prilipányiá”-nak (tapadási nívónak) nevezi. Boncs-Bruevics [24a], később Růvkin [7] vizsgálták azokat a feltételeket, amelyek meghatározzák, hogy a centrum rekombinációs centrumként, vagy csapdaként viselkedik.

Ezt nyilván az határozza meg, hogy milyen a C_n/C_p befogási paraméterek viszonya. Ha például C_n/C_p 0,1—10 közé esik, ez azt jelenti, hogy a centrum mindkét sávval elég jól kommunikál, azaz a centrum rekombinációs centrum. Ha pontosabban akarjuk a kritériumot felírni, akkor a C_n/C_p hányados nem elégséges, hiszen a betöltöttség, azaz a Fermi nívó aktuális értéke is szerepet kap. Azt kell figyelembe venni, hogy a (10) kifejezésben például a $C_n(n_0 + n_1)$ és $C_p(p_0 + p_1)$ mennyiségek szerepelnek egymás mellett. Mint Boncs-Bruevics megmutatta (n típusú félvezetőkben) az

$$r \equiv \frac{C_n}{C_p} e^{\frac{F_0 - E_c}{kT}}$$

viszonyt kell adott körülmények között vizsgálni. Amennyiben $r \gg 1$, akkor a centrum a lyukakra nézve jelent csapdát. Mindeztidáig nem hangsúlyoztuk, hogy a fent említett megoldások a stacioner és tranzien্স élettartamokra a rekombinációs egyenletek linearizálásával nyerhetők, jóllehet maguk az egyenletek tetszőleges nem-egyensúlyi koncentrációk mellett érvényesek. (Hallgatólágoosan feltéve természetesen a C_n , C_p paraméterek állandóságát.) Mindenképpen érdekes azonban, az a kérdés, hogy nagyobb gerjesztések esetén, amikor $\Delta n/n_0 \sim 1$, milyen lesz a nem-egyensúlyi töltéshordozók „élettartama”. Egy szokásos „élettartam” definíció erre az esetre az ún. differenciális élettartam, melyet a

$$\frac{1}{\tau(\Delta n)} = -\frac{1}{n} \frac{dn}{dt}$$

kifejezés ad meg. A stationer élettartam $S-R$ féle definíciója alapján könnyen kaphatunk egy olyan kifejezést, amelyben még Δn is szerepel, s amelyet a kísérletek is kellőképpen igazoltak. A (8) definíció és a (9) egyenlet alapján tetszőleges n -nél, vagy ahogy szokásos mondani, nagy injekciós szinteknél, a stationer élettartam:

$$\tau(\Delta n) = \frac{C_n(n_0 + n_1 + \Delta n) + C_p(p_0 + p_1 + \Delta n)}{C_n C_p N_t(n_0 + p_0 + \Delta n)} \quad (13)$$

Ebből lehet leolvasni a centrumokon keresztül történő rekombináció igen fontos tulajdonságát, hogy növekvő gerjesztéssel ($\Delta n \rightarrow \infty$) az élettartam *zérustól különböző* értékkel bír.

A közvetlen sugárzásos rekombináció esetén a $\tau_d(\Delta n)$ kifejezése (τ_d -direkt rekombináció) például *Roosbroeck* és *Shockley* alapján [3]:

$$\tau_d(\Delta n) = \frac{n_i^2}{R(n_0 + p_0 + \Delta n)}$$

amely Δn növelésével zérushoz tart. A probléma egzakt tárgyalása most fokozottabb nehézséget jelent, hiszen egy nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszert kell megoldani. Ezt általában csak numerikusan lehet elvégezni. Az ide vonatkozó munkák közül kiemelném *V. C. Nomura* és *J. S. Blakemore* munkáit [26], akik a $S-R$ modell esetében tetszőleges n mellett vizsgálták a differenciálegyenlet-rendszer megoldását.

3. A vizsgált modell: több elektronos, több gerjesztett nívóval rendelkező centrumok

Az előző pontban említettük, hogy a jelenleg legelfogadottabb rekombinációs modellben a rekombináció a centrum gerjesztett nívóin keresztül megy végbe. Ha ezek a nívók elég sűrűn helyezkednek el, akkor az egy-fononos gerjesztés elégséges, s így gondoskodni lehet arról, hogy a rekombinálódó elektron elveszítse az energiáját. Ha ehhez hozzávesszük azt a kísérleti tényt, hogy léteznek különböző töltésállapottal rendelkező centrumok is, azaz olyanok, melyek nemcsak egy, hanem $s = (0, 1, \dots, M)$ számú elektront képesek befogni, akkor kézenfekvő a gondolat, hogy mindegyik töltésállapotban is feltesszük az elegendő sűrűn elhelyezkedő gerjesztett nívó $j = (1, 2, \dots, m_s)$ létezését, ezek energiája $E_s^{(j)}$ és vizsgáljuk a rekombinációt ilyen centrumok esetében. Lényeges itt az, hogy jóllehet egy meghatározott és már befogott elektron gyorsan közlekedik a centrum különböző nívói között, azonban viszonylag sok szabad töltéshordozó van és sok centrum, így feltétlen figyelembe kell venni a teljes átmeneti sebesség meghatározásában *bármely* szabad töltéshordozónak az összes centrum lokalizált nívójára való befogásának lehetőségét, mert ezek összesen összemérhetők lehetnek az egyes centrumok gerjesztett állapotaiból az alapállapotba való átmenet sebességével. Vagyis, ha fel is tesszük

a) hogy a vezetési-sáv elektronjai és a valencia-sáv lyukai egymással, *különbö* kvázi egyensúlyban vannak, nem tételezhetjük fel, hogy

b) a centrumokba fogott elektronok egymás között kvázi egyensúlyban lennének. A fenti modellt stationer esetben *M. Nagae* vizsgálta [22]. A továbbiakban számunkra megfelelő formában átírva idézzük azokat az ún. tiszta befogási sebessé-

geket, melyekre szükségünk lesz. Tekintsünk tehát egy nem elfajult félvezetőt, melyben az elektronok koncentrációja n , illetve n_0 , a lyukak koncentrációja p , illetve p_0 . A rekombinációs centrumok koncentrációja pedig N_t . Ezek lehetséges állapotait az $[s, j]$ indexpárral jellemezzük. Az $s=(0, 1, \dots, M)$ a töltésállapotra, a $j=(1, 2, \dots, m_s)$ a gerjesztett nívókra vonatkoznak. Megállapodunk abban, hogy $j=1$ az alapállapotot jellemzi.

Tekintsük a következő átmeneteket:

$[s-1, h] \rightarrow [s, j]$: elektron befogás az $(s-1, h)$ állapotból az (s, j) állapotba;

$[s, j] \rightarrow [s, h]$: belső átmenet a gerjesztett nívók között;

$[s+1, h] \rightarrow [s, j]$: lyukbefogás.

Természetesen a fenti folyamatok, hasonlóan a kémiai reakciókhoz, fordított irányban is lefolyhatnak. Jelöljük az ún. *tiszta* sebességeket térfogategységre vonatkoztatva a következőképpen:

$$U_{sj}^{s-1, h}(n); U_{sh}^{sj}; U_{sj}^{s+1, h}(p) \quad (14)$$

ekkor a feladat abban áll, hogy az egyes átmenetekre vonatkozó állandók

$$C_n(s-1, h \rightarrow s, j), t(s, j \rightarrow s, h), C_p(s+1, h \rightarrow s, j)$$

és $n_s^{(j)}, n_{s0}^{(j)}$ segítségével ezeket kifejezzük. Igen fontos körülmény, hogy $n_s^{(j)}$ és $n_{s0}^{(j)}$ explicit alakjára ehhez nincs szükség. Tekintsük pl. az $[s-1, h] \rightarrow [s, j]$ elektron befogást. A 2. pontban követett $S-R$ féle gondolatmenettel erre az átmenetre is egyszerűen felírhatjuk a tiszta befogási sebességeket (térfogategységre vonatkoztatva):

$$U_{sj}^{s-1, h}(n) = N_t C_n(s-1, h \rightarrow s, j) \left[n p_{s-1}^{(h)} - n_0 \frac{p_{s-10}^{(h)}}{p_s^{(j)}} p_s^{(j)} \right].$$

Itt felhasználtuk a (4) egyenlethez analóg feltételt, azaz azt a tényt, hogy termikus egyensúlyban $U_{sj}^{s-1, h}(n) \equiv 0$, amely lehetőséget ad, hogy az egyetlen $C_n(s-1, h \rightarrow s, j)$ befogási paraméter elegendő legyen az $U_{sj}^{s-1, h}(n)$ meghatározására. Ha figyelembe vesszük, hogy

$$\frac{n_{s0}^{(j)}}{N_t} \equiv p_{s0}^{(j)}; \quad \frac{n_s^{(j)}}{N_t} \equiv p_s^{(j)} \quad (15)$$

akkor az $U_{sj}^{s-1, h}(n)$ így írható:

$$U_{sj}^{s-1, h}(n) = C_n(s-1, h \rightarrow s, j) \left[n n_{s-1}^{(h)} - n_0 \frac{n_{s-10}^{(h)}}{n_s^{(j)}} n_s^{(j)} \right] \quad (16)$$

Teljesen hasonlóan a *belső átmenetekre* írhatjuk:

$$U_{sk}^{sj} = t(s, j \rightarrow s, k) \left[n_s^{(j)} - \frac{n_{s0}^{(j)}}{n_s^{(k)}} n_s^{(k)} \right] \quad (17)$$

Végül a *lyukbefogásra*:

$$U_{sj}^{s+1, h}(p) = C_p(s+1, h \rightarrow s, j) \left[p n_{s+1}^{(h)} - p_0 \frac{n_{s+10}^{(h)}}{n_s^{(j)}} n_s^{(j)} \right] \quad (18)$$

A belső átmenetekre vonatkozóan itt egy megjegyzést kell tenni. Nyilván mindig igaznak kell lenni, hogy $U_{sk}^{sj} = -U_{sj}^{sk}$, ezért ebben az esetben a részleges egyensúly a következő alakban írható:

$$t(s, j \rightarrow s, k) n_{s0}^{(j)} = t(s, k \rightarrow s, j) n_{s0}^{(k)} \quad (19)$$

A bizonyításhoz elegendő a (17) egyenlet alapján a következőt felírni:

$$U_{sk}^{sj} = t(s, j \rightarrow s, k) n_{s0}^{(j)} \left[\frac{n_s^{(j)}}{n_{s0}^{(j)}} - \frac{n_s^{(k)}}{n_{s0}^{(k)}} \right]$$

másrészt

$$U_{sj}^{sk} = t(s, k \rightarrow s, j) n_{s0}^{(k)} \left[\frac{n_s^{(k)}}{n_{s0}^{(k)}} - \frac{n_s^{(j)}}{n_{s0}^{(j)}} \right] = -t(s, k \rightarrow s, j) \left[\frac{n_s^{(j)}}{n_{s0}^{(j)}} - \frac{n_s^{(k)}}{n_{s0}^{(k)}} \right] n_{s0}^{(k)}$$

amiből az $U_{sk}^{sj} = -U_{sj}^{sk}$ miatt a (19) adódik. A fentiek gyakorlati alkalmazása szempontjából célszerű a következőket figyelembe venni. Fizikailag eléggé plauzibilis és *M. Nagae* bizonyos egyszerű becsléseket tett is arra vonatkozóan, hogy egy centrum alapállapotban szívesebben fog be újabb elektront, illetve lyukat, mint a gerjesztett állapotban. Pontosabban, hasznos a következő feltevés:

$$\begin{aligned} \sum_{h=2} U_{s,h}^{s-1,h}(n) &\ll U_{sj}^{s-1,1}(n) \\ \sum_{h=2} U_{sj}^{s+1,h}(p) &\ll U_{sj}^{s+1,1}(p) \end{aligned} \quad (20)$$

A továbbiakban a (16)–(19) egyenleteket fogjuk gyakran használni, érdemes tehát ezekben a következő jelölést bevezetni:

$$\Gamma_{sj}^{rh} \equiv \frac{n_{r0}^{(h)}}{n_{s0}^{(j)}} \quad (21)$$

Összefoglalva a tiszta befogási sebességekre kapott kifejezéseket, írhatjuk:

$$\begin{aligned} U_{sj}^{s-1,h}(n) &= C_n(s-1, h \rightarrow s, j) [n n_{s-1}^{(h)} - n_0 \Gamma_{sj}^{s-1,h} n_s^{(j)}] \\ U_{sj}^{s+1,h}(p) &= C_p(s+1, h \rightarrow s, j) [p n_{s+1}^{(h)} - p_0 \Gamma_{sj}^{s+1,h} n_s^{(j)}] \end{aligned} \quad (22)$$

$$U_{sk}^{sj} = t(s, j \rightarrow s, k) [n_s^{(j)} - \Gamma_{sk}^{sj} n_s^{(k)}] \quad (23)$$

4. A rekombináció differenciálegyenlet-rendszere.

Az élettartam-mátrix

A 3. pontban meghatároztuk, hogy milyen modellt választunk vizsgálat tárgyául. Az ott lerögzített modell esetére a rekombináció és a $g-r$ zaj vizsgálata két egymástól független feladat megoldását követeli:

a) meg kell határozni az (s, j) állapotokkal rendelkező centrumok entrópia mátrixát;

b) meg kell határozni ezen felül az $A \equiv Lg$ élettartam-mátrixot.

Az a) feladatot a 9. pontban fogjuk megoldani ahol az entrópia mátrixot explicite megadjuk. A második feladat komplikált, ezért itt az A meghatározásához szükséges

egyenleteket írjuk fel explicite, magát az elemeket nem. Elvi nehézség nincs itt sem, de a túlságosan hosszú formulák felírása értelmetlen lenne. Az A mátrix felírásához meg kell határozni az elfogadott modell alapján a rekombinációt leíró teljes differenciálegyenlet-rendszert. Mint említettük, Nagae csak stacioner esetet vizsgált. Vizsgáljuk tehát, hogy milyen módon változhat meg az $[s, j]$ állapot. A modell alapján csak egy-elektron, illetve egy-lyuk átmeneteket fogunk figyelembe venni (vagyis pl. a 2. pontban említett Seinkman-féle modellt kizárjuk).

Az $[s, j]$ állapot *keletkezik* a következő folyamatok útján:

I. $[s-1, h] \rightarrow [s, j]$ elektron befogás

II. $[s+1, h] \rightarrow [s, j]$ lyuk befogás.

Az $[s, j]$ állapot a következőképpen *tűnhet el*:

III. $[s, j] \rightarrow [s, h]$ belső átmenet

IV. $[s, j] \rightarrow [s+1, h]$ elektron befogás

V. $[s, j] \rightarrow [s-1, h]$ lyuk befogás.

Megjegyezzük, hogy az I. és V., illetve a II. és IV. „reakciók” nem egymás megfordítottjai, mivel ezekben különböző komponensek (elektronok, illetve lyukak) szerepelnek. A fenti reakciók természetesen fordított irányban is végbe mehetnek. Tehát pl. I-re vonatkozóan az

$$[s-1, h] \rightleftharpoons [s, j]$$

felírás lenne helyes. A továbbiakban mégis az I—V. felírást használjuk, mert mindig az ún. U tiszta befogási sebességekkel fogunk számolni, mint azt a 3. pontban is tettük. Ha rendre az előbbi I—V. átmenetek tiszta befogási sebességeire az

$$U_{sj}^{s-1, h}(n); U_{sj}^{s+1, h}(p); U_{sh}^{sj}; U_{s+1, h}^{sj}(n); U_{s-1, h}^{sj}(p)$$

jelölést használjuk, (az első háromra lásd (22) és (23) egyenleteket) akkor az $n_s^{(j)}$ koncentrációk megváltozására írhatjuk:

$$\frac{dn_s^{(j)}}{dt} = \sum_{h=1}^{m_{s-1}} U_{sj}^{s-1, h}(n) + \sum_{h=1}^{m_{s+1}} U_{sj}^{s+1, h}(p) - \sum_{h=1}^{m_s} U_{sh}^{sj} - \sum_{h=1}^{m_{s+1}} U_{s+1, h}^{sj}(n) - \sum_{h=1}^{m_{s-1}} U_{s-1, h}^{sj}(p) \quad (24)$$

A „ h ” szerinti összegezés azt mutatja, hogy bármely gerjesztett nívóból (megfelelő töltésállapot mellett) lehetséges az átmenet. Megjegyzendő továbbá, hogy az első és utolsó tagban csak $s > 0$ lehet ($s=0$ -nál zérusok), a második és negyedik tag esetén csak $s < M$ lehet ($s=M$ esetén zérusok), míg a harmadik tagban nem jeleztük a $h \neq j$ -t, mivel ez a tag az $U_{sj}^{sh} = -U_{sh}^{sj}$ miatt úgyis zérus. A (24)-ben szereplő összes tiszta befogás tulajdonképpen ismert, jöllehet csak az első három tag van felírva a (22) és (23)-ban. Ez nyilván igaz, mert a negyedik tagban szereplő tiszta befogási sebesség az elsőből $s \rightarrow s+1$, az ötödik a másodikból $s \rightarrow s-1$ helyettesítéssel adódik.

Vizsgáljuk meg most a kapott egyenletek és az ismeretlenek számát. A (24)-ben $s[0 \dots M]$ a $j(1, 2, \dots, m_s)$ értékeket vehet fel. Összesen tehát $K = \sum_{s=0}^M m_s$ egyenlet van. Az ismeretlenek száma azonban $K+2$, mivel n és p is szerepel az egyenletekben.

A két hiányzó egyenletet a „zártági” feltételek adják. Egyrészt, definíció révén, a centrumok csak az $n_s^{(j)}$ állapotok valamelyikében lehetnek, azaz

$$\sum_{s,j} n_s^{(j)} = N_t \quad (25)$$

másrészt megköveteljük az elektromos semlegesség feltételének teljesülését, azaz a szokásos feltételek mellett:

$$\sum s n_s^{(j)} + n + N_a = p + N_d \quad (26)$$

Itt N_a , ill. N_d az ionizált akceptorok, ill. donorok koncentrációját jelenti. Látható bal oldalra a negatív, jobb oldalra a pozitív töltéseket gyűjtöttük össze. Az α változókra nézve a két mellékfeltételre kapjuk:

$$\sum \alpha_s^{(j)} = 0; \quad \sum s \alpha_s^{(j)} + \alpha_n = \alpha_p. \quad (27)$$

A két egyenlet alapján két tetszőlegesen választott koncentráció kifejezhető a többiek segítségével. Célszerűnek látszik pl. az $(r, 1)$ és $(r+1, 1)$ állapotoknak megfelelő $n_r^{(1)}$, $n_{r+1}^{(1)}$ koncentrációkat (vagy az $\alpha_r^{(1)}$, $\alpha_{r+1}^{(1)}$ változókat) kiválasztani. Ez két egymást követő töltésállapot *alapállapota*, mely mint az alkalmazásnál látni fogjuk, nem kell hogy szerepeljen az egyenletekben. Fontosabbak azok a gerjesztett nívók, amelyeknek a sávokkal való kapcsolata közvetlenebb.

A (25) és (26) egyenletekből egyszerű számítás útján kapjuk:

$$\begin{aligned} n_r^{(1)} &= n - p + \sum_{s,j}'' (s - r - 1) n_s^{(j)} + N_a - N_d + (r + 1) N_t \\ n_{r+1}^{(1)} &= p - n - \sum_{s,j}'' (s - r) n_s^{(j)} + N_d - N_a - r N_t \end{aligned} \quad (28)$$

ahol $\sum_{s,j}''$ jel azt jelenti, hogy az összegezésből az $[r, 1]$ és $[r+1, 1]$ állapotokat ki kell hagyni. Teljesen hasonló módon, vagy közvetlenül a (28) egyenletek alapján az α változókra a következő egyszerű kifejezéseket kapjuk:

$$\begin{aligned} \alpha_r^{(1)} &= \alpha_n - \alpha_p + \sum_{s,j}'' (s - r - 1) \alpha_s^{(j)} \\ \alpha_{r+1}^{(1)} &= \alpha_p - \alpha_n - \sum_{s,j}'' (s - r) \alpha_s^{(j)} \end{aligned} \quad (29)$$

Célszerű a (24) egyenletek mellett a $\frac{dn}{dt}$ és $\frac{dp}{dt}$ -t is *közvetlen* megadni. (Kísérletileg általában ezek határozhatók meg.)

Azonnal látható, hogy a

$$\frac{dn}{dt} = - \sum_{s=1}^M \sum_{j,h=1}^{m_s m_{s-1}} U_{sj}^{s+1,h}(n) \quad (30)$$

$$\frac{dp}{dt} = - \sum_{s=0}^{M-1} \sum_{j,h=1}^{m_s m_{s+1}} U_{sj}^{s+1,h}(p) \quad (31)$$

egyenleteket írhatjuk fel. Az így megadott $\frac{dn}{dt}$, $\frac{dp}{dt}$ és $\frac{dn_s^{(j)}}{dt}$ mennyiségek természetesen nem mondhatnak ellent a mellékfeltételeknek. Lássuk ezt be pl. az elekt-

romos semlegesség esetére. A (25) alapján írhatjuk:

$$\sum_{s,j} s \frac{dn_s^{(j)}}{dt} = \frac{dp}{dt} - \frac{dn}{dt} \quad (32)$$

Képezzük a bal oldalt a $\frac{dn_s^{(j)}}{dt}$ -re adott (24) alapján. Írhatjuk (némi átcsoportosítás után):

$$\begin{aligned} \sum_{s,j} s \frac{dn_s^{(j)}}{dt} = & \sum_{s,j} s \left[\sum_h U_{sj}^{s-1,h}(n) - \sum_h U_{s+1,h}^{sj}(n) \right] + \\ & + \sum_{s,j} s \sum_h U_{sh}^{sj} + \sum_{s,j} s \left[\sum_h U_{sj}^{s+1,h}(p) - \sum_h U_{s-1,h}^{sj}(p) \right] \end{aligned}$$

A második tagról azonnal látható, hogy zérus. Ez következik az $U_{sj}^{sh} = -U_{sh}^{sj}$ összefüggésből. Foglalkozunk tehát pl. az első szummával, amelyben az összegezést felcserélve kapjuk:

$$\sum_{s=1}^M s \sum_{s,h} U_{sj}^{s-1,h}(n) - \sum_{s=0}^{M-1} s \sum_{j,h} U_{s+1,h}^{sj}(n)$$

Itt az első tagban $s > 0$, a másodikban $s < M$. Végezzük el a második tagban az $s = r - 1$ helyettesítést és r helyébe azonnal írjunk ismét s -t. Ekkor kapjuk

$$\sum_{s=1}^M s \sum_{j,h} U_{sj}^{s-1,h}(n) - \sum_{s=1}^M (s-1) \sum_{j,h} U_{sh}^{s-1,j}(n) = + \sum_{s=1}^M \sum_{j,h} U_{sh}^{s-1,j}(n)$$

mivel az első két tag megsemmisíti egymást (közben a $j \leftrightarrow h$ indexcserét hajtottuk végre). Ez azonban éppen $-\frac{dn}{dt}$. Hasonlóan a harmadik tagról beláthatjuk, hogy az éppen $\frac{dp}{dt}$. Ami együtt a (32) jobb oldala.

Ezzel tetszőleges koncentrációk mellett megadtuk a rekombinációt leíró nem-lineáris differenciálegyenlet-rendszert (a két tetszőleges változó eliminálásához szükséges (28) egyenletekkel együtt). Ez eddig tudomásunk szerint az irodalomban nem volt ismeretes. Amennyiben csak a rekombináció érdekes, úgy (24), (31) egyenleteket kell megoldani (szükség esetén numerikusan); Ellenkező esetben a g és A mátrixok együttes megadása szükséges. Az A élettartam mátrix a fenti egyenletrendszerből nyerhető, ha ezt linearizáljuk, azaz bevezetjük az α változókat és az α -ban csak a lineáris tagokat hagyjuk meg. Ehhez a befogási sebességeket kell elsősorban linearizálni. A (22) és (23) egyenletekben ez egyszerűen elvégezhető:

$$\begin{aligned} U_{sj}^{s-1,h}(\alpha_n) &= C_n(s-1, h \rightarrow sj) [\alpha_n n_{s-10}^{(h)} + \alpha_{s-1}^{(h)} n_0 - n_0 \Gamma_{sj}^{s-1,h} \alpha_s^{(j)}] \\ U_{sj}^{s+1,h}(\alpha_p) &= C_p(s+1, h \rightarrow sj) [\alpha_p n_{s+10}^{(h)} + \alpha_{s+1}^{(h)} p_0 - p_0 \Gamma_{sj}^{s+1,h} \alpha_s^{(j)}] \\ U_{sh}^{sj}(\alpha) &= t(sj \rightarrow sh) [\alpha_s^{(j)} - \Gamma_{sh}^{sj} \alpha_s^{(h)}] \end{aligned} \quad (33)$$

Az egyenletrendszerünk összefoglalva ekkor a következő lesz:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\alpha_n}{dt} &= - \sum_{s=1}^M \sum_{j,h=1}^{m_s m_{s-1}} U_{sj}^{s-1,h}(\alpha_n) \\
 \frac{d\alpha_s^{(j)}}{dt} &= \sum_{h=1}^{m_{s-1}} U_{sj}^{s-1,h}(\alpha_n) + \sum_{h=1}^{m_{s+1}} U_{sj}^{s+1,h}(\alpha_p) - \sum_{h=1}^{m_s} U_{sh}^{sj}(\alpha) - \\
 &\quad - \sum_{h=1}^{m_{s+1}} U_{s+1,h}^{sj}(\alpha_n) - \sum_{h=1}^{m_{s-1}} U_{s-1,h}^{sj}(\alpha_p) \\
 \frac{d\alpha_p}{dt} &= - \sum_{s=0}^{M-1} \sum_{j,h=1}^{m_s m_{s+1}} U_{sj}^{s+1,h}(\alpha_p)
 \end{aligned} \tag{34}$$

A felesleges $\alpha_r^{(1)}, \alpha_{r+1}^{(1)}$ változók pedig a (29) alapján küszöbölendők ki. Ha az így kapott egyenleteket $\dot{\alpha} = -A\alpha$ alakban írjuk, megkaphatjuk az A élettartam-mátrixot. Most, a (34) egyenletrendszer¹ túlságosan bonyolult volta miatt, az A elemeit explicite nem adjuk meg. Az alkalmazásoknál explicite is felírjuk majd a vizsgált speciális eset A mátrixát. Az A karakterisztikus egyenletének gyökei adják az élettartamokat: $\left| A - \frac{1}{\tau} I \right| = 0$.

Ezzel lényegében megadtuk az általunk elfogadott modellre a rekombinációt leíró linearizált differenciálegyenlet-rendszert. Ez utóbbiból az A mátrix meghatározható.

5. Az irreverzibilis termodinamika módszeréről

Mielőtt a rekombináció és $g-r$ zaj irreverzibilis termodinamikai elmélete terén eddig elért eredményeket ismertetném, célszerűnek látszik magának a fenomenologikus irreverzibilis termodinamika azon fogalmait és főbb eredményeit ismertetni, amelyek a továbbiakban felhasználásra kerülnek. Ma már kiterjedt irodalom foglalkozik az irreverzibilis termodinamikának a fizika, a kémia, és a műszaki tudományok különböző területén való alkalmazásával. A fizika területén a transzport jelenségek tárgyalására gázokban, folyadékokban, szilárd-testekben és plazmákban nyújt egységes elméletet az Onsager-elmélet. A kémiában a kémiai reakciók tárgyalhatók segítségével. A műszaki tudományok terén mindenütt, ahol anyag és hőtranszport lép fel, hatásosan alkalmazható az elmélet.

Az alábbiakban megadott összefoglalás *I. Fényes* [27], *S. R. De Groot* [28] és *I. Prigogine* [29] munkáit követi. Az irreverzibilis termodinamika egyrészt az egyensúlyi, vagy másképpen termostatika fogalmaival, másrészt további, az elmélet által bevezetett fogalmakkal operál. Egy termodinamikai rendszert egyensúlyban az ún. extenzív, intenzív és potenciál mennyiségekkel lehet jellemezni. Alapvető a termodinamikában, hogy minden közelhatáshoz hozzárendelhető egy intenzitás

¹ A (34) egyenletrendszerben természetesen a külső generációk is figyelembe vehetők, amint azt az általános tárgyalásnál tesszük (lásd pl. (58) egyenletet). Erre azonban csak az alkalmazásoknál lesz szükség.

paraméter. Így jönnek létre pl. a termikus közelhatás — hőmérséklet, mechanikai hatás — nyomás, elektromos közelhatás — elektromos potenciál, kémiai kölcsönhatás — kémiai potenciál stb. hozzárendelések. Akkor és csak akkor van egy rendszerben egyensúly, ha ezek az intenzív mennyiségek a vizsgált rendszer minden pontjában azonos értékűek. Azaz konstans a hőmérséklet, a nyomás stb. Néha nem egyszerű felismerni azt az intenzív mennyiséget, amely az adott kölcsönhatást jellemzi. Minden esetre látható, hogy a termodinamikai *folyamatokban* meghatározó szerepe az intenzív mennyiségekben levő inhomogenitásoknak lesz. Az extenzív mennyiségek a rendszer kiterjedésével kapcsolatosak és minden (y_i) intenzív mennyiséghez egy meghatározott (x_i) extenzív mennyiség van konjugálva. A kapcsolatot a rendszernek az x_i extenzív mennyiségek függvényeként felírt $E = E(x_1 \dots x_n)$ energiája segítségével lehet felírni éspedig

$$y_i = \left(\frac{\partial E}{\partial x_i} \right)_{x_k = \text{konst}} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (35)$$

ha n számú közelhatást vizsgálunk.

Az $F(v)$ potenciál mennyiségek a következő definícióval adhatók meg [27]:

$$F(v) = E - \sum_{i=v+1}^n y_i x_i; \quad F(n) = E \quad (36)$$

A független változók meghatározott kiválasztásával kapjuk meg az $F(v)$ -höz tartozó *kanonikus* függvény kapcsolatot:

$$F(v) = F(x_1 x_2 \dots x_v, y_{v+1}, \dots, y_n) \quad (37)$$

azaz az $F(v)$ potenciál v extenzív és n intenzív mennyiséget tartalmaz független változóként. Könnyű belátni, hogy mivel, $dE = \sum_{i=1}^n y_i dx_i$, az F potenciál megváltozása:

$$dF(v) = \sum_{i=1}^v y_i dx_i - \sum_{i=v+1}^n x_i dy_i \quad (38)$$

Ha tehát az $F(v)$ -ben az x_i (v -ig), illetve y_i ($v+1$ -től n -ig) a független változó, akkor

$$\begin{aligned} y_i &= \frac{\partial F(v)}{\partial x_i} \quad (i = 1 \dots v) \\ x_i &= -\frac{\partial F(v)}{\partial y_i} \quad (i = v+1 \dots n) \end{aligned} \quad (39)$$

A második parciális deriváltakat $\gamma_{ik}(v)$ -vel jelöljük, amelyekre igaz nyilván $\gamma_{ik}(v) = \gamma_{ki}(v)$. Ha $i, k = 1, 2, \dots, v$, akkor

$$\gamma_{ik}(v) \equiv \frac{\partial^2 F(v)}{\partial x_i \partial x_k} = \frac{\partial y_i}{\partial x_k} \quad (40)$$

míg $i, k = v+1, \dots, n$ esetén

$$\gamma_{ik}(v) \equiv \frac{\partial^2 F(v)}{\partial y_i \partial y_k} = -\frac{\partial x_i}{\partial y_k} \quad (41)$$

Gyakran gyakorlati szempontból célszerű a (37)-ben az egyik x_i -t független változó-
nak tekinteni, pl. x_1 -t kifejezve

$$x_1 \equiv x(v) = x(F(v), x_2 \dots x_v, y_{v+1} \dots y_n) \quad (42)$$

A (38) alapján ilyenkor

$$dx(v) = \frac{dF(v)}{y_1} - \sum_{i=2}^v \frac{y_i}{y_1} dx_i + \sum_{i=v+1}^n \frac{x_i}{y_1} dy_i \quad (43)$$

A második deriváltakból itt is képezhetünk mátrixelemeket, melyeket $g_{ik}(v)$ -vel
jelölünk:

$$\begin{aligned} g_{1k} &= - \left(\frac{\partial^2 x(v)}{\partial x_k \partial F(v)} \right); \quad k = 1, 2, \dots, v; \quad g_{1k} = - \left(\frac{\partial^2 x(v)}{\partial y_k \partial F(v)} \right); \quad k = v+1 \dots n \\ g_{ik}(v) &= - \left(\frac{\partial^2 x(v)}{\partial x_i \partial x_k} \right) \quad i, k = 2, \dots, v \quad \text{ill.} \quad g_{ik}(v) = - \left(\frac{\partial^2 x(v)}{\partial y_i \partial y_k} \right) \quad i, k = v+1, \dots, n \\ g_{ik}(v) &= - \left(\frac{\partial^2 x(v)}{\partial x_i \partial y_k} \right) \quad \begin{matrix} i = 2, \dots, v \\ k = v+1 \dots n \end{matrix} \end{aligned} \quad (44)$$

Hogy egy rendszer leírásánál mely mennyiségeket válasszuk ki, azt a rendszer adatai
és számolási szempontok határozzák meg. Mi az $x(v)$ leírást fogjuk választani,
amikor x éppen az entrópia. Ez az irodalomban szokásos, jöllehet pl. *Van Vliet*
az $F(v)$ leírást részesítette előnyben. Nyilván a kapott eredmények a leírástól függet-
lenek.

Tovább menve a termodinamikai leírásban, a rendszer nem-egyensúlyi tulaj-
donságait kell vizsgálni. Nem-egyensúlyban az extenzív mennyiségek eltérnek
egyensúlyi értékeiktől és az intenzív mennyiségekben inhomogenitások lépnek fel.
Ha a jellemző termodinamikai potenciál $F(v)$, akkor

$$\Delta X_i \equiv a_i \equiv x_i - x_{i0}; \quad (i = 1, \dots, v) \quad (45)$$

$$Y_i(v) \equiv y_i - y_{i0} = \Delta y_i; \quad (i = v+1 \dots n) \quad (46)$$

Valamint $x(v)$ -re nézve:

$$\alpha_1 \equiv F(v) - F(v)_0 \quad (47)$$

$$\alpha_i \equiv \Delta x_i \equiv x_i - x_{i0}$$

$$X_1(v) = \frac{1}{y_1} - \frac{1}{y_{10}} = \Delta \frac{1}{y_1}$$

$$X_i(v) = - \left(\frac{y_i}{y_1} - \frac{y_{i0}}{y_{10}} \right) = \Delta \left(\frac{y_i}{y_1} \right) \quad (48)$$

Az a_i, α_i, Y_i, X_i mennyiségekből formálisan vektorokat képezhetünk (oszlop,
vagy sor), amelyeket $a(v), \alpha(v), Y(v), X(v)$ -nek jelölhetünk. Míg az $a(v), \alpha(v)$
az extenzív mennyiségek egyensúlytól való eltéréseiből képzett vektorok, az $Y(v),$
 $X(v)$ az ún. *általános termodinamikai erők* vektorai és látható, hogy az intenzív
mennyiségek egyensúlytól való eltérései adják meg. Fizikailag világos, hogy a

folyamatok oka a fenti erők zérustól különböző volta lesz. A γ_{ik} és g_{ik} -kból négyzetes mátrix szerkeszthető, mely segítségével az erők definíciója alapján írhatjuk:

$$\begin{aligned} Y &= \gamma a \\ X &= -g\alpha \end{aligned} \quad (49)$$

Ez azt mutatja, hogy kiválasztva az $F(v)$, vagy $x(v)$ leírást, az általános termodinamikai erők felírásához meg kell adni az $F(v)$ -t és képezni a γ mátrixot, vagy meg kell adni $x(v)$ -t és képezni a g mátrixot. Az $x(v)$ sok esetben a rendszer entrópiája, az extenzív mennyiségek függvényeként felírva. Ha a vizsgált, térben homogén rendszer nem-egyensúlyi állapotban van, akkor a (49) erők hatására áramok lépnek fel. Az elektromos töltés áramát az elektromos potenciálkülönbség, hőáramot (belső energia áramot) a hőmérsékletkülönbség hozza létre. Az ezekre vonatkozó összefüggések általánosítását Onsager adta meg. Eszerint az áramok és a fenti erők között lineáris kapcsolat van, melyet mátrix írásmódban így írhatunk:

$$\begin{aligned} \dot{a} &= -\lambda Y \\ \dot{\alpha} &= LX \end{aligned} \quad (50)$$

ahol λ és L szimmetrikus pozitív definit mátrixok. Az eddigiekből látható, hogy az $F(v)$ és $x(v)$ leírás teljesen hasonlóan tárgyalható. A továbbiakban a határozottság kedvéért tekintsük azt az esetet, amikor

$$X = -g\alpha \quad (51)$$

$$\dot{\alpha} = LX \quad (52)$$

Az $\dot{\alpha}$ mennyiségeket $\dot{\alpha} \equiv I$ áramoknak, fluxusoknak szokás nevezni. Az (52) egyenlettel történő leírás alapvető tulajdonsága, hogy a benne szereplő L vezetési mátrix szimmetrikus. Érvényes más szóval az Onsager-féle reciprocitási reláció:

$$L_{ik} = L_{ki} \quad (53)$$

Ennek bizonyítása a fluktuációk elméletéből (lásd pl. [28]), valamint tisztán fenomenologikus feltevések alapján is lehetséges [27]². A folyamatok időbeli lefutását is meg lehet kapni (51) és (52) alapján.

Például α -ra nézve (51)-ből az X -et (52)-be téve kapjuk

$$\dot{\alpha} = -Lg\alpha \equiv -A\alpha \quad (54)$$

vagy X -re nézve, az (51)-et időszerint deriválva és (52)-t felhasználva

$$\dot{X} = -gLX. \quad (55)$$

Az (54) és (55) egyenleteket nevezhetjük a termodinamika mozgásegyenleteinek. A 4. pontban valójában a rekombinációra vonatkozó mozgásegyenleteket megadtuk, pontosabban azt a differenciálegyenlet-rendszert, melynek linearizálásával a mozgásegyenlet nyerhető. Természetesen jelen pont tárgyalása sokkal általánosabb, hiszen α most nemcsak koncentrációkat tartalmaz, hanem bármely extenzív

² Mivel jelen összefoglalás nem tűzi ki célul az irreverzibilis termodinamika alapjainak tárgyalását, csak az eredmények ismertetése a cél, a bizonyítást elhagyjuk.

mennyiség egyensúlytól való eltérését. Az mindenesetre az általános és speciális tárgyalásban megegyezett, hogy a mozgásegyenletben csak az $A \equiv Lg$ (vagy $\tilde{A} \equiv gL$) mátrix lép fel, az L és g külön-külön nem. Ez azt jelenti, hogy a rendszer időbeli fejlődéséért, a 4. pontban a rekombinációért, csak az A mátrix, annak gyökei felelősek. Ezen egyenletek integrálása általánosan is elvégezhető. Ez valójában annak köszönhető, hogy homogén rendszereket az egyensúlyhoz közel vizsgálunk. A megoldások, mátrix írásmódot használva:

$$\alpha = e^{-Lgt} \alpha_0; \quad X = e^{-gLt} X_0 \quad (56)$$

ahol α_0, X_0 a $t=0$ -hoz tartozó értékek (és nem az egyensúlyban felvett értékek, melyek nyilván zérusok). Megjegyzendő, hogy az e^{-Lgt}, e^{-gLt} mátrix-függvények a hatványsoraikkal vannak definiálva. Azonban a mátrix-függvények kanonikus előállításának segítségével [30] a gL (és ami ugyanaz Lg) mátrix karakterisztikus egyenletének gyökei ismeretében, pl. a Lagrange-féle alappolinomok segítségével állíthatjuk elő az illető mátrix-függvényt. (Függelék.) Az (56) egyenleteket $t \rightarrow \infty$ -nél vizsgálva megállapíthatjuk a termodinamikai rendszer stabilitását. A stabilitás azt jelenti, hogy $t \rightarrow \infty$ -nél $\alpha \rightarrow 0, X \rightarrow 0$ kell legyen. Ez csak akkor lehetséges, ha az Lg (vagy ami ebből a szempontból ugyanaz gL) mátrix karakterisztikus egyenletének gyökei pozitívak. Annyit tudunk, hogy a g és L az esetek többségében pozitív definit. Ebből, mint azt meg lehet mutatni, a stabilitás következik.

Az (56) egyenletek az egyensúlyhoz való közeledést írják le, a kezdeti α_0, X_0 értékek megadása mellett. Világos azonban, hogy mind elvi, mind gyakorlati szempontból érdekes az a probléma, hogy milyen lesz egy nem-egyensúlyi állapothoz (pl. stacioner állapothoz) való tartás lefolyása. Mivel a stacioner állapot fenntartásához állandó külső forrásról kell gondoskodni, várható, hogy az (52) egyenleteket, mely homogén lineáris mátrix differenciálegyenlet, ki kell egészíteni az extenzív mennyiségek forrásával. Az (52) egyenletben $\dot{\alpha}$ akkor pozitív, ha a rendszer az egyensúlyhoz *visszatér*, a külső generációkat viszont akkor célszerű pozitívnak tekinteni, ha a rendszert az egyensúlytól *eltávolítja*.

Jelöljük tehát $G(t)$ oszlopvektorral az α extenzív mennyiségek egységnyi idő alatti külső generációját, akkor (52) helyett írhatjuk

$$\dot{\alpha} = LX - G(t) \quad (57)$$

és természetesen továbbra is megmarad az erők kifejezése:

$$X = -g\alpha$$

Ezeket figyelembe véve az ún. kényszerfolyamatokat leíró differenciálegyenletekre kapjuk:

$$\dot{\alpha} + Lg\alpha = -G(t) \quad (58)$$

míg az általános erőkre az

$$\dot{X} + gLX = gG(t) \quad (59)$$

egyenlet érvényes. Itt ismét abban a szerencsés helyzetben vagyunk, hogy a megoldás tetszőleges $G(t), \alpha_0, X_0$, mellett explicite felírható. Behelyettesítéssel pl. könnyű

verifikálni, hogy

$$\alpha = e^{-Lgt} \left[\int_0^t e^{Lg\tau} (-G(\tau)) d\tau + \alpha_0 \right] \quad (60)$$

$$X = e^{-gLt} \left[\int_0^t e^{gL\tau} gG(\tau) d\tau + X_0 \right] \quad (61)$$

A fentiek alapján spontán folyamatoknak tekintünk egy folyamatot, ha $G(t)=0$, míg kényszer folyamatról beszélünk akkor, ha $G(t) \neq 0$. Ismeretünk szerint az irodalomban ezt a tárgyalást elsőnek a szerző adta meg, 1961-ben megjelent dolgozatában [31]. Ugyanott két változó esetére explicite felírtuk a szóban forgó differenciálegyenleteket az egyes változókra szeparálva. A megoldásokat $G(t)=G_0$ esetre adtuk meg. A megoldásból következtetést lehet levonni a stacioner és a kényszer folyamatok közötti különbségre. Mielőtt a különbségtevést megtennénk, ismertetnénk a stacioner állapotokra vonatkozó Prigogine féle minimális entrópiaprodukció elvét. Ha a homogén rendszerben független X_i erők és I_i áramok vannak jelen, akkor az entrópiaprodukció σ , a következő egyenlettel van megadva [28], [29]:

$$\sigma = \sum_i X_i I_i$$

mely az egyszerű esetekből nyert tapasztalatok általánosításának tekinthető. Ha az I_i áramok az (52) egyenlet szerint lineáris kapcsolatban vannak az erőkkel, azaz

$$I = LX$$

akkor a σ egy pozitív definit kvadratikussá válik, lévén az L általában pozitív definit. Kapjuk tehát

$$\sigma = \sum_i \sum_k X_i L_{ik} X_k \geq 0$$

Vagyis az entrópiaprodukcióért az erők felelősek. Kérdés, hogy a stacioner állapotnak milyen entrópiaprodukció felel meg? Első, másod stb. fajú a stacioner állapot, ha egy, kettő stb. erő van rögzítve konstans értéken, miközben a rendszer a stacioner állapothoz tart. Rögzítsük az n számú közül k -t, azaz $X_1, X_2 \dots X_k$ változatlan. A kérdés most az, hogy milyen lesz valójában a minimális entrópiaprodukciót kielégítő állapot. Nyilván a független változók most az $X_{k+1} \dots X_n$ erők lesznek.

A $\left(\frac{\partial \sigma}{\partial X_i} \right) = 0$ ($i=k+1 \dots n$)-ből kapjuk, ha az áramok kifejezését figyelembe vesszük:

$$\sum_{j=1}^n (L_{ij} + L_{ji}) X_j = 0 \quad (i = k+1, \dots, n)$$

vagy mivel L szimmetrikus

$$2 \sum_{j=1}^n L_{ij} X_j = 0 \quad (i = k+1, \dots, n)$$

ami azt mutatja, hogy

$$I_{k+1} = I_{k+2} = \dots I_n = 0$$

Azaz a stacioner állapotban, amikor a szabadon hagyott erőkhöz tartozó áramok zérusok, az entrópiaprodukciónak minimális. Ezt a tételt két változóra *Prigogine*, a fenti általánosabb esetre *De Groot* mondta ki. Sajnos az elv egyáltalán nem ad olyan hathatós eszközt, mint az egyensúlyra vonatkozó entrópia-maximum elve.³

Térjünk most rá a kényszerfolyamatok vizsgálatára. Könnyű belátni, hogy pl. két változó esetén az erők és áramok időfüggése G_{01} , G_{02} generációk esetén a következők lesznek [31] ((13) és (16) egyenletek):

$$I_i = C_i e^{-\lambda_1 t} + d_i e^{-\lambda_2 t} + G_{0i} \quad (i = 1, 2)$$

$$X_i = A_i e^{-\lambda_1 t} + B_i e^{-\lambda_2 t} + M_i \quad (i = 1, 2)$$

ahol M_i -ket a G_{01} , G_{02} és a g mátrixelemei határozzák meg. A_1 , A_2 , B_1 , B_2 , C_1 , C_2 , d_1 , d_2 , a kezdeti feltételek által meghatározott állandók, λ_1 és λ_2 a karakterisztikus egyenlet gyökei. Számunkra az az érdekes, hogy $t \rightarrow \infty$ esetén érvényes lesz a következő összefüggés: $G_{01} = L_{11}M_1 + L_{12}M_2$; $G_{02} = L_{21}M_1 + L_{22}M_2$. Ez azonban időben változatlan, azaz stacioner. Ezen állapotok között szerepel egy, amely valóban kielégíti a minimális entrópiaprodukciónak elvét. Vagyis egy stacioner folyamat még nem vezet feltétlenül minimális entrópiaprodukciónak. A minimális entrópiaprodukciónak elvét kielégítő stacioner állapotot úgy nyerhetjük, ha pl. rögzített N mellett $G_{01} = 0$ -t teszünk fel. A külső generációk figyelembe vétele lehetőséget ad arra, hogy azt a szokásos problémát, hogy rögzített termodinamikai erőket vegyünk fel a valóságba átültessük, azaz megmondjuk, hogy az extenzív mennyiségeket hogyan kell generálni, hogy a kiválasztott erő rögzített maradjon. Úgy véljük, a Le Chatelier—Braun elv egy következetesebb megfogalmazása adható, ha az elvben szereplő zavart (vagy erők konstansul tartását), a fenti $G(t)$ -kel vesszük figyelembe. A kérdés vizsgálata azonban nem tartozik jelen munka keretébe, hasonlóan azon alkalmazások köre, mellyel a szerző egy régebbi dolgozatában foglalkozott (Knudsen gáz [32]). Hangsúlyozni szeretnénk, hogy az itt vázolt elmélet lineáris, azaz az egyensúlytól való kis eltérésekre vonatkozik. Másrészt homogén egységekkel foglalkozunk, azaz a vizsgált mennyiségek a helytől függetlenek. Ez ad lehetőséget az egyenletek integrálására általános esetben. Az elméletben szereplő g és L mátrixok meghatározására a fenomenologikus elmélet maga nem ad általános módszert. A g meghatározásához pl. meg kell adni a rendszer entrópiáját az extenzív mennyiségek függvényeként, mely általában nem könnyű feladat. Az L mátrixot vagy empirikusan határozzuk meg, vagy a kinetikus elméletekhez folyamodunk. Mint láttuk, gyakran az $A \equiv Lg$ mátrix megadása az egyszerűbb, felvéve egy konkrét modellt. Mivel g és L függetlenek, azonos g -hez még tetszőleges *transzport modellek* választhatók.

³ Az elv alkalmazásához a rendszer olyan nagyfokú ismerete szükséges, hogy maga az elv *nem ad újat* a már meglevő ismeretekhez képest. Másrészt olyan rendszert konstruált *M. Klein*, amikor a tényleges stacioneritás és a minimális entrópiaprodukciónak elve nem ekvivalensek. Mindezek alapján az elv alkalmazásától el fogunk tekinteni. [38].

6. A zaj spektrális eloszlásának meghatározása: a Green-Callen disszipációs fluktuációs theoremata

Mindezidáig nem esett szó a fluktuációk irreverzibilis termodinamikai elméletéről. Mivel a későbbiekben csak extenzív mennyiségek (részecske szám, koncentrációk) fluktuációjával, azok spektrális eloszlásával fogunk foglalkozni, nem merül fel az az elvi probléma, hogy intenzív mennyiségeknek a fluktuációját hogyan lehet elvileg helyesen meghatározni. A mi problémánk az lesz, hogy adva van az energianívók rendszere, mely egyensúlyban az egyensúlyi eloszlási függvény szerint van betöltve. Kérdés, milyen lesz az egyensúlyi érték körüli fluktuáció, mi lesz annak spektrális eloszlása, feltéve, hogy a rendszer termodinamikailag teljesen ismert, azaz pl. a g és L mátrixok explicite adottak, vagy legalábbis elvben meghatározhatók.

A zaj, a fluktuációk tárgyalása különböző feltételek mellett végezhető el. Egyensúlyi zaj, stacioner állapotbeli és időtől függő „jelen” ülő zaj lehet a kísérlet és elmélet számára érdekes. A jelen összefoglalás csak az egyensúlyi zaj tárgyalásával foglalkozik, jóllehet, az irodalomban 1960-ban jelent meg *M. Lax* [33] kiváló dolgozata, ahol a stacioner állapotból történő fluktuációkat is tárgyalja. Az alábbi tárgyalás *Lax* idézett munkáját követi. Legyen $I(t)$ stacioner valószínűségi változó, amely fluktuál, azaz

$$\langle I(t) \rangle = 0 \quad (62)$$

A stacioneritás követelménye azt jelenti, hogy a sokaság átlagokra vonatkozóan érvényes a következő összefüggés:

$$\langle I(t+t')I(t') \rangle = \langle I(t)I(0) \rangle \quad (63)$$

azaz a zajt illetőleg az időnek abszolút kezdete lényegtelen, a (63) átlag t' -től független. A df frekvenciaintervallumban ($\omega = 2\pi f$) az $I(t)$ stacioner valószínűségi változó zajteljesítménye $G(f)df$ a következő egyenlettel van definiálva:

$$G(I, f) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{2}{T} \left\langle \left| \int_{-T/2}^{+T/2} I(t) e^{-2\pi i f t} dt \right|^2 \right\rangle \quad (64)$$

Ekkor a *disszipált* „teljesítmény”:

$$\langle I^2 \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T I^2(t) dt = \int_0^\infty G(f) df \quad (65)$$

A (64) egyenletet, melyben az f négyzete szerepel, felírhatjuk két integrál szorzataként, s figyelembe véve a (63)-at, kapjuk:

$$G(f) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} \langle I(t)I(0) \rangle dt \quad (66)$$

Ez azt mondja ki, hogy a korrelációs függvény Fourier-transzformációja adja a zajspektrumot (Wiener—Hincsin-formula). A (66) úgy írható fel, hogy csak $t > 0$ -t

tartalmazzon, ha a $G(f)$ -t

$$G(f) = G_+(f) + G_-(f) \quad (67)$$

alakba bontjuk fel, ahol

$$G_+(f) = 2 \int_0^\infty e^{-i\omega t} \langle I(t) I(0) \rangle dt; \quad G_-(f) = 2 \int_0^\infty e^{i\omega t} \langle I(0) I(t) \rangle dt \quad (68)$$

Könnyű belátni, hogy $G_+(f) = G_-(-f)$. Ha $I(t)$ egy oszlopvektor, akkor $G(f)$ mátrixot jelent, és igaz lesz, hogy

$$G_-(f) = G_+^\dagger(-f) \quad (69)$$

azaz G és G_+ egymásnak hermitikus adjungáltja és összegük $G(f)$, ezért hermitikus mátrix.

A fentiekből látható, hogy az egész zajprobléma az $\langle I(t) I(0) \rangle$ második momentum meghatározására redukálódik. Vagyis nem szükséges a teljes $W(I(0), I(t))$ eloszlásfüggvény ismerete, csupán ennek második momentuma.

A további számolás alapja, hogy feltesszük a szóban forgó fluktuáló mennyiségekről α (oszlopvektor), hogy azok Markov-típusú véletlen változókat reprezentálnak. Egy ilyen rendszer alaptulajdonsága, hogy a rendszer jelenlegi állapota elválasztja a múltbeli viselkedést a jövőtől. A jelen pillanatbeli ismeret a jövő „átlagos” viselkedését megadja. Az α változóban Markov-folyamatot képző rendszer a $P(\alpha(0)/\alpha t)$ feltételes valószínűséggel teljesen jellemezhető. Ez megadja annak valószínűségét, hogy ha $t=0$ -ban $\alpha(0)$ volt, akkor t -ben $\alpha(t)$ legyen az α értéke. *Megfelelően* választott α változók esetén, azok valóban Markov-rendszert képeznek, azaz viszonylag rövid idő alatt elfelejtik a múltat. Szemléletesen az α kiválasztása a rendszerben fellépő relaxációs idők ismeretében történhet. Pl. egy félvezetőben a bevitt nem-egyensúlyi töltéshordozók néhány mikrosekundum alatt rekombinálnak, néhány milisekundum alatt diffundálnak, ugyanakkor a sebességek elkenődése 10^{-11} secundum alatt történik meg. Ez azt jelenti, hogy jóval a 10^{11} Hz alatti tartományban az $n(r, t)$ koncentráció, egy diffúziós egyenletet elégíti ki és jó leírást ad, míg 10^{11} Hz felett egy fázistérbeli $f(r, p, t)$ leírás szükséges. Vagyis 10^{-11} secundum után röviddel a rendszer elfelejtje a sebesség kezdeti értékét, még tovább várva $t \rightarrow \infty$ -nél pedig beáll az egyensúly, vagy egy stacioner állapot. Legyen a $W(\alpha)$ ennek valószínűsége. Akkor a $W(\alpha_0, \alpha)$ együttes valószínűségi eloszlásra írhatjuk:

$$W(\alpha_0, \alpha) = W(\alpha_0) P(\alpha_0/\alpha t) \quad (70)$$

Azonban nincs szükségünk a teljes eloszlás ismeretére, csupán ennek második momentumára, melyet így írhatunk:

$$\langle \alpha(0) \alpha(t) \rangle = \int \alpha_0 W(\alpha_0) d\alpha_0 \langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} \quad (71)$$

ahol

$$\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} = \int P(\alpha_0/\alpha, t) \alpha d\alpha \quad (72)$$

az $\alpha(t)$ feltételes középértéke, $\alpha(0) = \alpha_0$ kezdeti értékeket feltételezve.

Látható, ahhoz, hogy tovább menjünk, szükség van két mennyiség ismeretére.

Meg kell határozni

1. a $W(\alpha)$ eloszlást (egyensúlyban, vagy stacioner állapotban)
2. és az $\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0}$ -t a fluktuációk átlagos regresszióját, lecsengését.

Egyensúlyban a $W(\alpha)$ meghatározásához a fluktuációk Einstein-féle tárgyalását lehet felhasználni. *Einstein* javasolta, hogy az

$$S(\alpha) = k \ln W(\alpha)$$

összefüggés megfordítható, ami által a W valószínűség meghatározható, ha ismert a rendszer entrópiája. Egyensúly közelében $S(\alpha)$ sorbafejthető, ekkor mátrix-írásban kapjuk,

$$S \approx S_0 - \frac{1}{2} \frac{\alpha g \alpha}{k} \quad (73)$$

Ezt a Boltzmann-összefüggésbe téve kapjuk:

$$W \approx N \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\alpha g \alpha}{k} \right) \quad (74)$$

Ennek az eloszlásnak ismeretében az $\langle \alpha \alpha \rangle$ meghatározható. Egyszerű számítás mutatja, hogy [28]:

$$\langle \alpha \alpha \rangle = k g^{-1} \quad (75)$$

Azt várjuk, hogy a (73) sorbafejtéssel kapott (74) eloszlás, amelyben a magasabb rendű tagokat elhagytuk az egzakt második momentumokat jól megközelíti. Annál meglepőbb, hogy a (75) „közelítő” kifejezés egzakt. Ezt *Green* és *Callen* bizonyították (ez azt jelenti, hogy nem szükséges pl. feltenni, hogy a változóink Gauss-eloszlást követnek) [34].

Az $\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0}$ lecsengését annak alapján írhatjuk fel, hogy feltesszük: a fluktuációk lecsengése a makroszkopikus egyenletek alapján megy végbe. Az (56) egyenlet szerint ez azt jelenti, hogy

$$\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} = \exp(-Lgt) \alpha_0 \quad (76)$$

Vagyis a számunkra oly fontos $\langle \alpha(t) \alpha(0) \rangle$ mennyiség így írható a fenti (76) alapján:

$$\langle \alpha(t) \alpha(0) \rangle = \exp(-Lgt) \langle \alpha \alpha \rangle \quad (77)$$

ahol

$$\langle \alpha \alpha \rangle = \int \alpha \alpha W(\alpha) d\alpha \quad (78)$$

és ez az időtől független.

De az előzőek szerint (lásd (75) formula) az $\langle \alpha \alpha \rangle$ és a „ g ” egyszerű kapcsolatban vannak, vagyis végül kapjuk

$$\langle \alpha(t) \alpha(0) \rangle = \exp(-Lgt) k g^{-1} \quad (79)$$

A (68) egyenlet alapján a fenti egyenlet segítségével a $G_{\pm}(f)$ meghatározható és egyszerű integrálás után kapjuk:

$$G_+(f) = 2(i\omega + Lg)^{-1} k g; \quad G_-(f) = 2k g^{-1} (-i\omega + \widetilde{Lg})^{-1} \quad (80)$$

ahol a \sim jel transzponálást jelent. Láthatjuk tehát, hogy a zajspektrumot az L és g ismeretében meg tudjuk határozni. A *Green—Callen disszipációs fluktuációs theorem* azt állítja, ha meghatározzuk a rendszernek egy külső perturbációra adott válaszát a rendszer ún. admittancia mátrixának segítségével (ez frekvencia függő, ezért beszélünk admittanciáról), akkor a zajspektrum és az $Y(\omega)$ admittancia egyszerű kapcsolatban van.

A levezetés a következő szillogizmuson alapul:

a) a zaj frekvencia-spektruma az $\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0}$ Fourier transzformáltja által van meghatározva. Az $\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0}$ mennyiség egy α_0 nagyságú spontán fluktuáció „regresszióját” írja le;

b) a fluktuációk regressziója makroszkopikus mozgásegyenletet elégít ki;

c) a makroszkopikus mozgásegyenlet egy frekvenciatartományban leírható a rendszer admittanciájával, tehát kapcsolatnak kell lenni a zaj és az admittancia között.

Először is megmutatjuk, hogy miképpen kell az $Y(\omega)$ -t definiálni és akkor a fenti eredményekkel való egyszerű összehasonlítás útján kapjuk a kívánt tételt. Az Appendixben egy igen egyszerű levezetést adunk, kiindulva *Van Vliet* egyváltozóra adott levezetéséből, amelyből a frekvenciafüggés is közvetlenül leolvasható lesz. Az (58) egyenletben szorozzunk végig L^{-1} -el balról és írjuk a $-L^{-1}G(t)$ kifejezést P/T alakban, akkor kapjuk:

$$L^{-1}\alpha + g\alpha = \frac{P}{T} \quad (81)$$

Tegyük most fel, hogy a P az időtől függ és pedig $\exp(i\omega t)$ szerint. Ekkor a rendszer válaszát az admittanciát a következő egyenlettel definiáljuk

$$\frac{d\alpha}{dt} = Y(\omega)P \quad (82)$$

Mivel $\dot{\alpha} = i\omega\alpha$, egyszerű számítás adja, hogy

$$Y(\omega) = \frac{1}{T} \left(L^{-1} + \frac{g}{i\omega} \right)^{-1} \quad (83)$$

Itt még csak azt kell megjegyeznünk, hogy a (64) definíció alapján az $\dot{\alpha}(t)$ és az $\alpha(t)$ -vel kapcsolatos zajspektrum között az

$$\omega^2 G(\alpha, f) = G\left(\frac{d\alpha}{dt}, f\right) \quad (84)$$

összefüggés áll fenn, s akkor egyszerű átalakítás mutatja, hogy

$$\omega^2 G(\alpha, f) = G\left(\frac{d\alpha}{dt}, f\right) = 4kT \operatorname{Re} Y(\omega) \quad (85)$$

és ez éppen a *Green—Callen disszipációs fluktuációs theorem*, mely szerint a zaj spektrális eloszlása arányos a rendszer, admittanciájának valós részével.

A valóságban a (85) formula a klasszikus *Nyquist* theorem általánosítása. Csak megemlíthjük, hogy a stacioner állapotbeli fluktuációknál, valamint a (85)

kvantummechanikai levezetéséből további korrekciós faktorok lépnek fel. Számunkra azonban a (85) alak teljesen megfelel. A következő igen lényeges körülményre kell felhívni a figyelmet. A irreverzibilis folyamat időbeli lefutásának leírásához az $A = Lg$ mátrix ismerete szükséges, illetve a mátrix karakterisztikus egyenletének gyökeit kell meghatározni. Külön-külön L és g nem lép fel. Nem ez a helyzet a fluktuációk spektrális sűrűségének leírásánál. Akár a (80), akár a (83), illetve (85) formulákat nézzük, ezekben az $Lg \equiv A$ mellett még g és L is szerepel. Ahhoz tehát, hogy a zajproblémát leírjuk, a rendszer teljes termodinamikai ismerete, a g és L mátrixok ismerete szükséges. Mint a későbbiekben látni fogjuk, éppen ezt az utat tartjuk szem előtt, a rekombináció és a generáció-rekombináció zaj leírásánál. Természetesen nem feltétlen szükséges az L és g , elég például L és A meghatározása. Más szóval az L , g és A mátrixok közül kell bármely kettőt meghatározni.

A jelen összefoglalásban nem törekedtünk a fenomenologikus irreverzibilis termodinamika szisztematikus tárgyalására. Célunk az volt, hogy a legalapvetőbb fogalmait és eredményeit (melyekre szükségünk lesz) összefoglaljuk. Talán kissé tovább időztünk a zajspektrum meghatározásánál, mivel ezek a vizsgálatok nem kerülnek elő a szokásos tankönyvekben és monográfiákban, szemben az elmélet egyéb részeivel.

Ugyancsak részletesebben tértünk ki a külső generációk figyelembe vételére. A Green—Callen féle theorem levezetését megfigyelve azonnal látszik, hogy mi az általunk adott külső generációk és a (81)-ben szereplő P erő közt a különbség. Míg mi a $G(t)$ -ben az extenzív mennyiségek reális generációját vesszük tekintetbe, addig a P arra volt jó, hogy segítségével a rendszer $Y(\omega)$ admittanciáját definiáljuk, egyéb fizikai értelme nincs [37].

7. A rekombináció és $g-r$ zaj irreverzibilis termodinamikai elméletének eddigi eredményei

A 2., 5. és 6. pont röviden tartalmazzák a rekombináció, a fenomenologikus irreverzibilis termodinamika és zaj elméletének főbb eredményeit. Ha az ismertett elmélet lényeges vonásait tekintjük, azt lehet mondani, hogy a vizsgált transzport folyamatnak (esetünkben a rekombinációnak), akkor adjuk meg az irreverzibilis termodinamikai elméletét, ha sikerül:

1. megadni nem-egyensúlyban a betöltöttséget;
2. megadni a rendszer egyensúlyát jellemző g entrópia-mátrixot;
3. megtalálni a megfelelő általános termodinamikai erőket (X), melyek a folyamatokat okozzák;
4. megadni még az L vezetési, vagy az $A \equiv Lg$ élettartam-mátrixot, melyek az áramokat szabják meg.

Míg a g mátrixban csak az egyensúlyi koncentrációk szerepelnek, addig az L vagy A mátrixok a kinetikára jellemző átmeneti valószínűséget is fogják tartalmazni. Innen is látni, hogy egy meghatározott rendszert (a rekombinációs centrumok koncentrációját, energia viszonyait) lerögzítve és a hozzátartozó g -t megadva, még számos rekombinációs modellt illeszthetünk ebbe a képbe. Természetesen, hogy melyik helyes, azt végül is a kísérletekkel való összevetés dönti el.

A rekombináció és $g-r$ zaj irreverzibilis termodinamikai elméletében látható, hogy mind a „rendszer”, mind a „modell” változott és mindig az újabb kísér-

leti eredmények interpretálása, vagy az elvi megfontolások számára szükséges irányban bővült.

Ismeretünk szerint *K. M. Van Vliet* [39] az első, aki a rekombináció és $g-r$ zaj irreverzibilis termodinamikai elméletével foglalkozott. Az 1958-ban megjelent dolgozata, azonnal azt az általánosabb esetet tárgyalja, amikor *több egyszerű $S-R$ centrum van jelen*. Az ún. „free energy language”-t használja, azaz a rendszer szabadenergiájából indul ki. Figyelembe veszi, hogyha az elektronok lehetséges állapotai $E_1 \dots E_s$, melyekben $n_1 \dots n_s$ elektron van, (ezek között szerepel pl. a vezetési és valencia sáv is), akkor $\alpha_i \equiv n_i - n_{i0}$ mennyiségekre érvényes, hogy

$$\sum_{i=1}^s \alpha_i = 0 \quad (86)$$

Az általános termodinamikai erők egyszerűen a következők lesznek:

$$X_i = F_s - F_i \quad (i = 1, 2, \dots, s-1) \quad (87)$$

amely mutatja, hogy a rekombinációt a kémiai reakciókhoz hasonlóan a kémiai potenciálkülönbségek szabják meg (kvázi Fermi nível). Az X_i erők ismeretében $\dot{\alpha}_i$ -kra ad meg egy kifejezést a szerző, az átmeneti valószínűségek segítségével. Ehhez felhasználja még, hogy az i -ik nível betöltöttsége nem-egyensúlyban az

$$n_i = \frac{N_i}{1 + \exp\left(\frac{E_i - F_i}{kT}\right)} \quad (88)$$

formulával adható meg, ahol N_i az E_i energiájú nívelok száma, F_i a már fentebb is szereplő kvázi Fermi nível. Ez azt jelenti, hogy *egy adott rekombinációs centrumhoz egy meghatározott kvázi Fermi nívelt rendel, a nem egyensúlyi betöltöttség meghatározásához*. Jelölje továbbá P_{ij} az elektronok $E_i \rightarrow E_j$ átmeneteinek számát egységnyi idő alatt, amelyre írhatjuk:

$$P_{ij} = \gamma_{ij} n_i (N_j - n_j) \quad (89)$$

ahol $N_j - n_j$ azon E_j energiájú nívelok száma, amelyekben nincs elektron γ_{ij} állandó. Az i -ik níveln az elektronok számának megváltozását így írhatjuk (89) segítségével:

$$\dot{\alpha}_i = \sum_{j=1}^s (P_{ji} - P_{ij}) \quad (90)$$

ahol a \sum' jel azt jelenti, hogy $i=j$ tagot ki kell hagyni. Felhasználva a (88)-at: sorbafejtve az egyensúlyhoz közel, valamint figyelembe véve, hogy egyensúlyban $P_{ij}^0 = P_{ji}^0$ (részleges egyensúly elve) kapjuk az $\dot{\alpha}_i$ áramokra:

$$\dot{\alpha}_i = \sum_{j=1}^s P_{ij}^0 (F_j - F_i) / kT \quad (91)$$

Az általános erők (87) és az áramok (91) kifejezése alapján a vezetési mátrix L meghatározható. A szabadenergia-mátrixot f -t, (amely most a g entrópia-mátrix helyébe lép) a szerző egyszerűen határozza meg, a statisztikus mechanika segítségével. Mivel

$$\bar{F} = \sum_i E_i n_i - TS$$

az $S = \sum S_i$ tagot kell meghatározni az n_i -k segítségével.⁴ Az i -ik nívó járulékát nyilván úgy kapjuk, ha az n_i elektront a N_i számú nívón a lehetséges módokon elosztjuk; a lehetséges mikroállapotok száma ekkor:

$$\Omega_i = \frac{N_i!}{n_i!(N_i - n_i)!}$$

ahonnan az $S_i = k \ln \Omega_i$, vagyis

$$\bar{F}_i = n_i E_i - kT \ln \Omega_i$$

lesz az i -ik nívó szabadenergia járuléka. Ha a $F_i = \frac{\partial \bar{F}_i}{\partial n_i}$ definíciót tekintjük, akkor

$$F_i = E_i + kT \ln n_i - kT \ln (N_i - n_i)$$

ahonnan a (88) formula adódik. A fenti tárgyalásokban a spin el van hanyagolva. Ha az i -ik nívó éppen a vezetési, illetve valencia-sáv, akkor egyszerű parabolikus sáv és m_e , m_h effektív tömegek esetén az N_i -t az ún. effektív állapotsűrűség helyettesíti:

$$N_c = 2(2\pi m_e kT/h^2)^{3/2}; \quad N_v = 2(2\pi m_h kT/h^2)^{3/2}$$

és a szabadenergiákra kapjuk

$$\bar{F}_e = n_e E_c - n_e kT \ln (V N_c / n_e); \quad \bar{F}_h = p_h E_v - p_h kT \ln (V N_v / p_h) \quad (92)$$

Ahol V a kristály térfogata. Legyen most $n_e/V = n$, $p_h/V = p$, akkor a F_n és F_p definíciója alapján kapjuk:

$$n = N_c \exp \left(\frac{F_n - E_c}{kT} \right); \quad p = N_v \exp \left(\frac{E_v - F_p}{kT} \right) \quad (93)$$

Számunkra a továbbiakban fontos lesz, hogy nem-elfajult sávok esetén ismerjük a vezetési elektronok, illetve valencia-sáv lyukainak entrópia járulékát. Ezt minden nehézség nélkül a (92) egyenletből leolvashatjuk. Nyilván (térfogategységre írva) kapjuk:

$$S_n = -kn \ln n/N_c; \quad S_p = -kp \ln p/N_v \quad (94)$$

Valóban az L megadásával ((91) egyenlet) és \bar{F} -nek a szabadenergiának a meghatározásával a probléma meg van oldva. Alkalmazásként a szerző a legegyszerűbb esetet tárgyalja részletesen, amikor egyetlen S — R centrum van jelen. A zaj konkrét tárgyalásánál a szerző úgy jár el, hogy megkeresi azt a C transzformációs mátrixot, amellyel az élettartam mátrix A diagonalizálható, azaz $A' = CAC^{-1}$ diagonális. Ehhez a fogáshoz azért fordul, mert a Green—Callen disszipációs fluktuációs théoréma (másképpen az általánosított Nyquist formula) mátrix írásmódban nem mutatja meg *szembeszökően* a zaj frekvenciafüggését. Mint később látni fogjuk, a mátrix-függvények kanonikus előállításával erre a transzformációra nincs szükség.

Mielőtt az újabb eredmények ismertetésére rátérnénk, helyén való a zaj kérdések kissé részletesebb tárgyalása. Az előző paragrafusban megadtuk M. Lax tárgyalását követve a fluktuációk spektrális eloszlásának általános kifejezését.

⁴ A szabadenergiát jelentő F -nél a felül húzás a kvázi Fermi nívótól való megkülönböztetésre és nem valami féle átlagolásra vonatkozik.

A (64), (65) definíciók több változó esetén mátrix összefüggésekké alakulnak, ahol (65)-ben pl. I^2 helyébe $I\tilde{I}$ kerül.

Most az a kérdés merül fel, hogy a kapott eredmények alapján, tehát pl. a Green—Callen disszipációs fluktuációs theorema alapján hogyan határozhatjuk meg a rendszerben a generáció-rekombináció zajt, annak spektrumát. Tegyük fel tehát, hogy ismerjük a rendszer entrópia-mátrixát (g), az élettartam-mátrix (A) karakterisztikus egyenletének gyökeit és az (L) vezetési mátrixot. Ekkor a (85) adja a zaj spektrális eloszlását és (83) az abban szereplő $Y(\omega)$ admittancia mátrixot. A (83) így írható:

$$Y(\omega) = \frac{1}{T} \left[L^{-1} + \frac{g}{i\omega} \right]^{-1} = \frac{1}{T} \left[I + \frac{A}{i\omega} \right]^{-1} L$$

Van Vliet pl. a második alakot használja és erre alkalmazza a már említett transzformációt, amellyel az A mátrix diagonalizálható. A transzformációnál fellépnek az A karakterisztikus egyenletének gyökei és meg tudja határozni a frekvencia függést. Kérdés, hogyan kapcsolhatók ezek a mennyiségek mérhető adatokhoz? Tekintsünk egy félvezetőt, melyben n_0 elektron, p_0 lyuk van. Az \mathcal{E} térerősség hatására

$$i_0 = (en_0\mu_n + ep_0\mu_p)\mathcal{E} = e\mu_p(n_0b + p_0)\mathcal{E}$$

áram folyik ($b-a$ mozgékonyaságok hányadosa). Azonban e körül az értékek körül fluktuálni fog az áram, mivel a generáció-rekombináció miatt az n_0 és p_0 pillanatnyi értéke n és p különbözőn fog n_0 és p_0 -tól. Általában

$$i = e\mu_p(bn + p)\mathcal{E}$$

lesz érvényes. Képezzük a $\Delta i \equiv i - i_0$ kifejezést, majd ennek négyzetének várható értékét. Ekkor kapjuk

$$\langle \Delta i^2 \rangle = \frac{i_0^2}{(bn_0 + p_0)^2} [\langle \Delta n^2 \rangle b^2 + 2\langle \Delta n \Delta p \rangle b + \langle \Delta p^2 \rangle]$$

Azonban éppen a fenti kifejezésben szereplő $\langle \Delta n^2 \rangle$, $\langle \Delta n \Delta p \rangle$, $\langle \Delta p^2 \rangle$ mennyiségek spektrális eloszlását kapjuk meg a $G(\alpha, f)$ mátrix megfelelő elemeiből azaz a G_{nn} , G_{pp} , G_{np} tagokból. Írhatjuk tehát a $\langle \Delta i^2 \rangle$ spektrális eloszlására G_i -re:

$$G_i = \frac{i_0^2}{(bn_0 + p_0)^2} [b^2 G_{nn} + 2bG_{np} + G_{pp}] \quad (95)$$

A (95) használandó a kísérletekkel való összevetésnél. Könnyű belátni, hogy a G_i spektrum, jöllehet csak a G_{nn} , G_{np} , G_{pp} elemek lépnek fel benne, általában tartalmazni fogja az összes relaxációs időeknek megfelelő spektrumtartományokat (Appendix II).

Legújabbban D. A. Evans és P. T. Landsberg [40] vizsgálták azt az esetet, amikor a rekombinációs centrum több töltésállapottal rendelkezik (nem vizsgálták azt hogy ezen töltésállapotnak még különböző gerjesztett nívói lehetnek). Tárgyalásuk lényeges pontja, hogy a különböző „s” töltésállapotú ($s=0, 1, \dots, M$) centrum nem-egyensúlyi betöltöttségének leírására egyetlen F_i kvázi Fermi nívót használnak. Azaz, ha kiindulnak az ún. trapping statistics más szóval a nagy kanonikus eloszlás egyensúlyban érvényes kifejezéséből, akkor a centrumokban levő elektronok

átlagos számát *nem-egyensúlyban* a következővel adták meg.⁵

$$n_t = \frac{N_t \sum_{s=0}^M s Z_s \exp\left(\frac{sF_t}{kT}\right)}{\sum_{s=0}^M Z_s \exp\left(\frac{sF_t}{kT}\right)} \quad (96)$$

ahol Z_s az s elektront tartalmazó centrum állapotösszege, azaz

$$Z_s = \sum_i \exp\left(-\frac{E[s, i]}{kT}\right)$$

Itt kell megjegyezni, hogy a nagy-kanonikus eloszlást elsőnek P. T. Landsberg alkalmazta a félvezető statisztikában és azt „trapping statistics”-nak nevezte [13], [14]. A nagy-kanonikus eloszlás olyan sokaságnak adja meg az állapotok feletti eloszlás függvényét, mely termikus, és anyagi kapcsolatban van a környezetével. Világos, hogy a rekombinációs centrumokban levő elektronokat éppen ilyen rendszernek lehet tekinteni. A különböző sokaságokat *T. Hill* tárgyalta egységesen könyvében [41], mint azt a 8. pontban részletesebben tárgyaljuk. Könyvéből idézzük a nagy-kanonikus sokaság esetén érvényes eloszlást. Jelöljük (*Hill* könyvének jelölését számunkra célszerűbb formában megváltoztatva) $p_{s0}^{(j)}$ -val annak (feltételes) valószínűségét *egyensúlyban*, hogy a sokaság kiválasztott elemében s részecske van („ s ” töltésállapotnak nevezhető, ha a részecskék pl. elektronok) és j -dik energianívót foglalja el feltételezve, hogy a rendszer térfogata V . Nyilvánvaló, hogy a különböző s -ekhez tartozó azonos j sorszámú energia különböző lehet, ezért $E_s^{(j)}$ -vel jelöljük az energiákat. A nagy-kanonikus eloszlás explicite megadja a $p_{s0}^{(j)}$ valószínűséget, a T hőmérséklet, az F_0 (kémiai potenciál) Fermi-nívó az „ s ” és az $E_s^{(j)}$ függvényében a következő módon:

$$p_{s0}^{(j)} = \frac{\exp\left(\frac{sF_0}{kT}\right) \exp\left(\frac{E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta_0}$$

ahol a Θ_0 statisztikus összeg:

$$\Theta_0 = \sum_{s,j} \exp\left(\frac{sF_0}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_s^{(j)}}{kT}\right)$$

Ha a fentieket a (rekombinációs) centrumokra alkalmazzuk, akkor p_{s0}^j azonosítható az $\frac{n_{s0}^{(j)}}{N_t}$ mennyiséggel, mely tehát azon centrumok hányadát jelenti, amely az összes N_t -ből az $[s, j]$ állapotban van. Hogy a különböző töltésállapottal rendelkező centrum jellemezhető-e egyáltalán egyetlen F_t kvázi Fermi-nívóval *nem-egyensúlyban*, azt az idézett szerzők is vizsgálták, és arra a megállapításra jutottak, hogy csak igen speciális esetben igaz ez a feltevés.⁶ Ennek ellenére a dolgozatban ez

⁵ A későbbiekben utalunk arra, hogy véleményünk szerint miért folyamodtak ehhez a közelítéshez, annak ellenére, hogy az előző dolgozatban Landsberg említi, hogy a különböző s állapotokhoz különböző F_s kvázi Fermi-nívó rendelhető.

⁶ Az érvényesség matematikai feltétele, olyan összefüggések fennállását követeli meg a centrumok paramétereit között, melyek sehonnan nem következnek.

döntő szerepet játszik és ez engedi meg a sávok és a centrum egységes tárgyalását. Mindenesetre bizonyos, hogy ez a feltevés kizárja annak lehetőségét, hogy a centrum egyik töltésállapotból a másikba való átmenetét, mint leírható folyamatot tekintsük (most nem beszélünk adott, állandó töltésállapot mellett a különböző gerjesztett nivóba való átmenetről, hiszen ennek tárgyalását nem is tűzték ki célul a szerzők). Ezután a szerzők megmutatják, hogy a sávok és a centrumok egységesen tárgyalhatók, amin azt értjük, hogy az α_i -kre (sávok és centrum) érvényes a következő összefüggés

$$\alpha_i = \xi_i n_{i0} (F_i - F_0) \quad (97)$$

ahol $i = n, p, t$ (azaz a vezetési, valencia-sáv és a rekombinációs centrum), vagyis az „egyes nivókon” a koncentrációnak az egyensúlytól való eltérése kifejezhető egyedül a *saját* kvázi Fermi nivójának egyensúlytól való eltéréseivel. Mint látni fogjuk, az általunk adott tárgyalás eltekint a közös F_i kvázi Fermi nivó feltételezésétől, de ennek megfelelően nem lehet a sávokat ilyen értelemben egységesen tárgyalni.

A továbbiakban a szerzők a szokásos módon járnak el; meghatározzák az f mátrixot (szabadenergia mátrixot), valamint az átmeneti sebességeket is kifejezik a kvázi Fermi nivó segítségével. Ezzel mind az élettartam, mind a zaj spektrális eloszlásának meghatározásához szükséges mennyiségeket megkapták.

8. A nem-egyensúlyi betöltöttség: a nagy-kanonikus sokaság eloszlásfüggvényének általánosítása

Mielőtt rátérnénk a nem-egyensúlyi betöltöttség meghatározására, röviden összefoglaljuk a statisztikus mechanikának az egyensúlyra vonatkozó néhány eredményét.

Termodinamikai *egyensúlyban* egy rendszer állapotát, pontosabban az egyes állapotok valószínűségét, a rendszerre jellemző eloszlásfüggvényből határozhatjuk meg. Hogy mi lesz a jellemző eloszlás, azt a rendszer és környezetének kapcsolata szabja meg. Ilyen kapcsolat lehet termikus, anyagi, mechanikai stb. A teljesség kedvéért néhány *szokásos* kölcsönhatásnak megfelelő sokaságot és eloszlásfüggvényt felsorolunk [41]; *Hill* megmutatja, hogy termodinamikai *egyensúlyban* a következő jellemzések érvényesek.⁷

Független változók	Környezettel való kontaktus	Statisztikus összeg	Alapvető termodinamika függvény	A sokaság neve
V, N, E	kontaktus nincs	$\Omega = \sum_k 1$	$-kT \ln \Omega = TS$	mikro-kanonikus
V, N, T	termikus	$Q = \sum_k e^{-\frac{E_k}{kT}}$	$A = -kT \ln Q$	kanonikus
V, F, T	anyagi és termikus	$\Theta = \sum_{k,N} \exp \left(\frac{NF - E_k(N)}{kT} \right)$	$-kT \ln \Theta = -pV$	nagy-kanonikus

⁷ Nem jelent félreértést, hogy a táblázatban szereplő mennyiségek, jóllehet egyensúlyra vonatkoznak, nincsenek ellátva a szokásos „0” index-szel.

Világos, ha a rekombinációs centrumokat (pontosabban a bennük levő elektronokat), mint a kristályba ágyazott rendszert tekintjük, akkor ennek leírására a nagy kanonikus sokaság jöhet szóba. Ezt, mint az előző pontban említettük, *P. T. Landsberg* ismerte fel, s e statisztikát a félvezetőkre alkalmazva „trapping statistics”-nek nevezte. Ismételten írjuk fel *egyensúlyban* annak $p_{s0}^{(j)}$ valószínűségét, hogy a centrumot s -edik töltésállapotban (a táblázatban $N=s$ jelölést jelent) és a j -edik energia nívóban (a táblázatban $k=j$) találjuk V térfogatot feltételezve (általában egységnyi térfogatot fogunk használni, azaz koncentrációkról beszélünk majd):

$$p_{s0}^{(j)} = \frac{\exp\left(\frac{sF_0 - E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta_0}; \quad \Theta_0 = \sum_{s,j} \exp\left(\frac{sF_0 - E_s^{(j)}}{kT}\right) \quad (98)$$

Ehhez jön még a normálási feltétel, amely szerint

$$\sum_{s,j} p_{s0}^{(j)} = 1$$

azaz kell, hogy a centrum az $[s, j]$ állapotok valamelyikében legyen.

A továbbiakban lényeges, hogy az egyes $p_{s0}^{(j)}$ valószínűségeket kifejezhessük a centrumok összes N_t koncentrációja és $[s, j]$ állapotú centrumok $n_{s0}^{(j)}$ koncentrációjával:

$$p_{s0}^{(j)} \equiv \frac{n_{s0}^{(j)}}{N_t} \quad (99)$$

Felmerül a kérdés, hogy nem-egyensúlyban mi helyettesíti a (98) formulát. A (99) persze teljesen formálisan így írható:

$$p_s^{(j)} \equiv \frac{n_s^{(j)}}{N_t} \quad (100)$$

de ez még nem adja meg explicite a nem-egyensúlyi eloszlást. Felmerül a kérdés, hogy vajon leírható-e a centrum állapota egyetlen F_t kvázi Fermi nívóval (a vezetési-sáv elektronjaihoz hasonlóan), vagy esetleg minden töltésállapothoz kell különböző F_s $s=[0, 1, \dots, M]$ kvázi Fermi nívót rendelni. Ilyen fajta leírások eleve kizárják vagy azt, hogy átmenetek legyenek különböző töltésállapotok között, vagy hogy adott s mellett a gerjesztett nívók között legyenek átmenetek, hiszen az $[s, j] \rightarrow [s, k]$ átmenethez csak úgy várható „hajtó erő”, ha ezekhez különböző kvázi Fermi nívót rendelünk. Ez vezet arra a gondolatra, hogy *nem-egyensúlyban a centrum különböző $[s, j]$ állapotához különböző $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi nívót rendeljünk*. Mint látni fogjuk, ez lesz a további tárgyalás lényeges pontja. Ezen $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi nívók fogják meghatározni a rekombinációs folyamatok („kémiai reakciók”) általános termodinamikai erőit. A nagy kanonikus sokaság nem-egyensúlyra tehát a következőképpen általánosítható:

$$p_s^{(j)} = \frac{\exp\left(\frac{sF_s^{(j)} - E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta}; \quad \Theta = \sum_{s,j} \exp\left(\frac{sF_s^{(j)} - E_s^{(j)}}{kT}\right) \quad (101)$$

Természetesen a normálási feltétel továbbra is megmarad:

$$\sum_{s,j} p_s^{(j)} = 1 \quad (102)$$

Itt felmerülhet az a probléma, hogy milyen megfontolás alapján lehet a (101)-ben az egyensúlyban érvényes T hőmérsékletet beírni. Ehhez megjegyezzük, hogy az elfogadott modell szerint a ráccsal *termikus* egyensúlyban levő vezetési elektron-gáz rekombinációjáról van szó, a valencia-sávnak ugyancsak a ráccsal *termikus* egyensúlyban levő lyuk-gázával, az N_i koncentrációjú centrumokon keresztül. A sávokban a termalizálás igen rövid idő alatt megy végbe: 10^{-12} sec. Másrészt kísérleti evidenciák vannak, hogy pl. a gerjesztett nívóba való átmenet a vezetési-sávból $10^{-8} - 10^{-9}$ secundum alatt megy végbe. Ennyi idő alatt természetesen a sávban a termalizálódás már végbement. Hasonlóan a lyukbefogásnál. Ez alapján természetesnek látszik az a feltevés, hogy a centrum *összes* nem-egyensúlyi állapotához *egyetlen* $T = T_{\text{rács}}$ hőmérsékletet, de különböző $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi nívót rendelünk.

A sávokra természetesen továbbra is megtartjuk a szokásos (93)-as formulát. Azaz az elektronok, illetve a lyukak a sávokban *egyetlen* F_n , illetve F_p kvázi Fermi nívóval jellemezhetők. Mint említettük (93) nem elfajult sávokra érvényes. Az, hogy a nem elfajult sávok ilyen egyszerűen kezelhetők, annak a körülménynek köszönhető, hogy egyszerű parabolikus (vagy akár ellipszoid) energia felületek esetén a sávok jellemezhetők *egyetlen* E_c , illetve E_v energia nívóval és a hozzátartozó effektív állapotsűrűséggel N_c , illetve N_v -vel. A fentiekből világos, ha a vezetési-sáv egyszerű szerkezete megszűnik, a fenti közelítés nem érvényes. Ez kialakulhat pl. alacsony hőmérsékleten extrém nagy mágneses térben, ahol a vezetési elektronok

az $\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$ helyett $\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \left(\frac{1}{2} + n'\right) \hbar \omega_c$ energiával rendelkeznek. Itt

$\omega_c = \frac{eH}{m_e c}$ a ciklotron frekvencia. Ez azt jelenti, hogy az $n' = 0, 1, \dots$ kvantumszámok-

nak megfelelően az állapotsűrűségnek kitüntetett nívói vannak. Ezek jelenlétében egy rekombinációs folyamat leírásakor már nem feltétlen lehetséges pl. a vezetési elektronokat *egyetlen* F_n kvázi Fermi nívóval jellemezni, hanem a különböző n' -höz tartozó csoportoknak külön $F_n^{(n')}$ nívót kell rendelni. Ismeretünk szerint erre a körülményre eddig nem hívták fel a figyelmet. Kísérleti kimutatás alacsony hőmérsékleten történő élettartammérésekkel lenne lehetséges. Ha pl. egyszerű $S-R$ centrumot feltételezünk, akkor $H=0$ esetén mért élettartam a mágneses tér bekapcsolására megváltozik. Ebben a változásban a különböző n' -kel rendelkező sávok közötti átmenetek is szerepelni fognak. A betöltöttséget nem egyensúlyban a fentiek szerint meghatározhatjuk az $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi nívók segítségével. A (101) kifejezés segítségével hasznos összefüggés adható meg: a koncentrációk egyensúlytól való eltérései kifejezhetők a kvázi Fermi nívók egyensúlytól való eltérései segítségével. Ez a sávok esetén igen egyszerű. A vezetési-sávra pl. a (93) egyenlet alapján írhatjuk az egyensúlyhoz közel:

$$n - n_0 \equiv \alpha_n = n_0 \frac{dF_n}{kT} \quad (103)$$

ahol $dF_n = F_n - F_0$. A valencia sávra teljesen hasonlóan az

$$\alpha_p = -p_0 \frac{dF_p}{kT} \quad (104)$$

összefüggés adódik. Tegyük fel, hogy a tilos-sávban egyféle rekombinációs centrum van, E_i energia nívóval, N_i koncentrációval. A centrumnak nincsenek gerjesztett

nívói, és csak egyetlen elektron befogadására képes, (a (88) egyenlethez hasonlóan a spintől is eltekintünk), ekkor a Fermi—Dirac eloszlás a (88)-nak megfelelően az egyensúlyi betöltöttségre az

$$n_{t0} = \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)}$$

kifejezést adja.

Nem-egyensúlyban a betöltött nívók száma

$$n_t = \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)} \quad (105)$$

ahol F_t az E_t nívóhoz rendelt kvázi Fermi nívó. Képezzük most az $n_t - n_{t0} \equiv \alpha_{nt}$ mennyiséget. Ismét az egyensúlyhoz elég közel, egyszerű sorfejtés útján kapjuk:

$$n_t = n_{t0} + \frac{N_t \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_t - F_0}{kT}\right)\right]^2} \frac{1}{kT} dF_t$$

Ami alapján írhatjuk

$$\alpha_{nt} = \frac{n_{t0} p_{t0}}{N_t} \frac{dF_t}{kT} \quad (106)$$

Itt felhasználtuk, hogy $n_{t0} + p_{t0} = N_t$ és p_{t0} jelöli a betöltetlen centrumok számát. Számunkra most csak az a fontos, hogy az egyszerű centrum esetén is az α_{nt} kifejezhető saját kvázi Fermi nívójának F_t -nek az egyensúlytól való eltérése segítségével.

Vizsgáljuk most az általunk tárgyalt általános esetet. Feladat tehát az $\alpha_s^{(j)} \equiv n_s^{(j)} - n_{s0}^{(j)}$ mennyiséget meghatározni a $dF_s^{(j)}$ -k, illetve ha lehet egyetlen $dF_s^{(j)}$ segítségével. A (101) egyenletből kapjuk

$$n_s^{(j)} = N_t \frac{\exp\left(\frac{sF_s^{(j)} - E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta} \quad (107)$$

Képezzük most ennek a megváltozását az egyensúlyhoz közel. Most arra kell vigyázni, hogy a Θ az összes $F_s^{(j)}$ -t tartalmazza. Az

$$\alpha_s^{(j)} = N_t \left[\frac{\exp\left(\frac{sF_s^{(j)} - E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta} - \frac{\exp\left(\frac{sF_0 - E_s^{(j)}}{kT}\right)}{\Theta_0} \right]$$

kifejezés az egyensúlyhoz közel így írható:

$$\alpha_s^{(j)} = s n_{s0}^{(j)} \frac{dF_s^{(j)}}{kT} - n_{s0}^{(j)} \frac{d\Theta}{\Theta} \quad (108)$$

ahol $d\Theta \equiv \Theta - \Theta_0$, a Θ megváltozása. Ez tartalmazza általában az összes $F_s^{(j)}$ megváltozását, s csak nagyon speciális esetben lesz zérus, vagy függ csak az egyetlen $dF_s^{(j)}$ -től.

A fenti általános tárgyalásból is adódik, hogy egy olyan centrum nem-egyensúlyi betöltöttsége, mely csak két töltésállapottal rendelkezik; s és $s+1$, valóban leírható egyetlen F_t kvázi Fermi nivó segítségével. Írhatjuk:

$$n_s = \frac{N_t \exp\left[\frac{sF_s - E_s}{kT}\right]}{\Theta}; \quad n_{s+1} = \frac{N_t \exp\left[\frac{(s+1)F_{s+1} - E_{s+1}}{kT}\right]}{\Theta}$$

ahol most Θ igen egyszerű kéttagú kifejezés:

$$\Theta = \exp\left[\frac{sF_s - E_s}{kT}\right] + \exp\left[\frac{(s+1)F_{s+1} - E_{s+1}}{kT}\right]$$

Mivel az $n_s + n_{s+1} = N_t$ összefüggés érvényes, F_s és F_{s+1} nem lesz független egymástól. Ahelyett, hogy ennek az összefüggésnek segítségével az F_s és F_{s+1} kapcsolatát meghatároznánk, megkeressük azt az egyetlen F_t -t, amely leírja a két állapot nem-egyensúlyi betöltöttségét.

Könnyű belátni, hogy n_s és n_{s+1} így írhatók

$$n_{s+1} = \frac{N_t}{1 + \exp\left[\frac{E_{s+1} - E_s - [(s+1)F_{s+1} - sF_s]}{kT}\right]}$$

$$n_s = \frac{N_t \exp\left[\frac{E_{s+1} - E_s - [(s+1)F_{s+1} - sF_s]}{kT}\right]}{1 + \exp\left[\frac{E_{s+1} - E_s - [(s+1)F_{s+1} - sF_s]}{kT}\right]}$$

Vezessük be most a következő jelöléseket:

$$E_t \equiv E_{s+1} - E_s \quad (109)$$

$$F_t \equiv (s+1)F_{s+1} - sF_s \quad (110)$$

$$n_{s+1} \equiv n_t; \quad n_s \equiv p_t \quad (111)$$

akkor kapjuk az s -től függetlenül

$$p_t = \frac{N_t \exp\left(\frac{E_t - F_t}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_t}{kT}\right)}; \quad n_t = \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{E_t - F_t}{kT}\right)}$$

ami megegyezik a szokásos feltevéssel: a centrum leírható egyetlen kvázi Fermi nivó segítségével, a Fermi—Dirac eloszlással. Hogy ez így van az α -kra vonatkozóan is az az általunk adott általános (108) formulából is közvetlenül adódik.

Nézzük pl. az α_{s+1} -re vonatkozó kifejezést:

$$\alpha_{s+1} = (s+1)n_{s+10} \frac{dF_{s+1}}{kT} - n_{s+10} \frac{d\Theta}{\Theta_0}$$

nyilván

$$\frac{d\Theta}{\Theta_0} = \frac{sn_{s0}}{N_t} \frac{dF_s}{kT} + (s+1) \frac{n_{s+10}}{N_t} \frac{dF_{s+1}}{kT}$$

kapjuk tehát

$$\begin{aligned} \alpha_{s+1} &= (s+1)n_{s+10} \frac{dF_{s+1}}{kT} - n_{s+10} \left[\frac{sn_{s0}}{N_t} \frac{dF_s}{kT} + \frac{(s+1)n_{s+10}}{N_t} \frac{dF_{s+1}}{kT} \right] = \\ &= \frac{n_{s+10}(N_t - n_{s+10})(s+1)}{N_t} \frac{dF_{s+1}}{kT} - \frac{n_{s+10}n_{s0}s}{N_t} \frac{dF_s}{kT} = \\ &= \frac{n_{s+10}n_{s0}}{N_t} \frac{(s+1)dF_{s+1} - s dF_s}{kT} \end{aligned}$$

Ebből a (110) és (111) jelölések alapján kapjuk

$$\alpha_{nt} = \frac{n_{t0}p_{t0}}{N_t} \frac{dF_t}{kT}$$

teljes egyezésben a (106) formulával.

Az előzőekben tehát beláttuk, hogy a sávok esetén vagy akkor, amikor a centrum „egyszerű” (két töltésállapot, gerjesztett nívó nélkül) a nem-egyensúlyi be-töltöttség egyetlen kvázi Fermi nívóval írható le. Világos azonban, hogy bonyolultabb esetben ez nem engedhető meg. Ennek ellenére *D. E. Evans* és *P. T. Landsberg* a különböző töltésállapotú centrum nem-egyensúlyi leírására egyetlen F_t kvázi Fermi nívót vezetett be. (Lásd (96) formula.) Ez nyilván nem lehet kielégítő, hiszen így a centrumokban levő elektronoknak csak valamilyen *kevésbé megalapozott*, átlagos viselkedése írható le. Pontosabban szólva az egyes töltésállapotok közti átmenetek, $s \rightarrow s+1$ stb., mindenképpen más-más befogási állandókkal írandók le, mégis a szerzők a centrumokban levő átlagos elektronszámot tekintik egyedüli változóknak. Ezzel a sok-elektronos centrumok rekombinációs problémáját lényegében az egyszerű $S-R$ modellre vezetik vissza. Megjegyzendő, hogy Landsberg egy előző dolgozatában a stacioner élettartam tárgyalásakor a különböző s állapotú centrumhoz különböző F_s kvázi Fermi nívót rendel. Valószínű, hogy később azért tértek rá az egyszerűsítésre, mert nem találták meg ebben az esetben az entrópia-mátrix megadásának módját. Látni fogjuk azonban, hogy ez még akkor is lehetséges, ha a centrum a különböző töltésállapotok mellett még különböző gerjesztett nívóval is rendelkezik. Ez a módszer a centrumok átlagos jellemzésére talán megengedhető, ha csak a töltésállapot változik. A gerjesztett nívók feltételezése esetén azonban, mint azt egy konkrét eset vizsgálata is mutatni fogja, ez a közelítés éppen a lényeges fizikai jellemzők elhagyását jelentené: a sávból való befogást és a nívók közti átmenetek szétválasztását elvileg is lehetetlenné tenné, jóllehet ez a feladat megoldása alapvető a rekombináció elemi aktusainak, a rekombináció mechanizmusának megértésében. Ismereteink szerint mindeztideig *közvetlen* kísérleti anyag nincs a szétválasztásra.

Befejezésül, a továbbiakban hasznosnak mutatkozó összefüggést adunk meg. Összegezzünk (108)-ban s és j szerint, ekkor a (102) miatt a bal oldal zérus, vagyis kapjuk:

$$\sum_{s,j} s n_{s0}^{(j)} \frac{dF_s^{(j)}}{kT} - \frac{d\Theta}{\Theta_0} \sum_{s,j} n_{s0}^{(j)} = 0$$

Felhasználva a $\sum_{s,j} n_{s0}^{(j)} = N_t$ összefüggést, kapjuk:

$$\frac{d\Theta}{\Theta} = \sum_{s,j} \frac{s n_{s0}^{(j)}}{N_t} \frac{dF_s^{(j)}}{kT} \quad (112)$$

9. Az entrópia-mátrix és az általános termodinamikai erők meghatározása

A vizsgált rendszer entrópiáját a szóban forgó extenzív mennyiségek (jelen esetben a koncentrációk) függvényében kell meghatározni, hogy a g mátrix elemeit megadhatassuk. A rendszer entrópiáját a sávok és a centrumok entrópiájárulékából fogjuk megadni. Jelölje s_n illetve s_p a vezetési, illetve valenciasáv, s_t a centrumok entrópia-járulékát. Termikusan homogén rendszerről lévén szó, a teljes entrópiát

$$s(n, \dots n_s^{(j)} \dots p) = s_n(n) + s_p(p) + s_t(\dots n_s^{(j)} \dots) \quad (113)$$

alakban írhatjuk. A (113) egyenlet is, mint az eddigiek általában (kivéve a (92) formulát) a térfogategységre vonatkozik. Az $s_n(n)$ és $s_p(p)$ -re egyszerűen a (94) képletek érvényesek, melyek nem elfajult sávok esetén az ideális elektron és ideális lyukgáz entrópiáját adják. Hangsúlyozni szeretnénk, hogy a nem elfajult sáv feltételezése nem lényeges kikötés és csak a számítás egyszerűségét célozza. A számítás elfajult sávok esetén is keresztülvihető, de akkor fellépnek az ún. Fermi integrálok is. Mivel itt nem elvi nehézségről van szó, a továbbiakban *csak nem elfajult* sávokkal fogunk foglalkozni. Ez a feltételezés a nem túl kis tilos sávú és nem túl szennyezett félvezetők esetén természetes (pl. normál tisztaságú Ge és Si). Mivel ily módon s_n és s_p ismertek, csupán az s_t -vel kell foglalkozni.

Egyensúlyban a centrumok entrópiájárulékának meghatározására a nagykanonikus eloszlás entrópia kifejezését használhatjuk. Ha $p_{s0}^{(j)}$ jelenti az $[s, j]$ állapot valószínűségét egyensúlyban, feltételezve az adott (jelen esetben az egységnyi térfogatot), akkor egyetlen centrum által adott entrópiájárulék:

$$S'_{t0} = -k \sum_{s,j} p_{s0}^{(j)} \ln p_{s0}^{(j)}$$

Térfogategységben N_t centrum van, vagyis kapjuk:

$$s_{t0} = -k N_t \sum_{s,j} p_{s0}^{(j)} \ln p_{s0}^{(j)}$$

ahol $p_{s0}^{(j)}$ a (98) egyenlettel van megadva az $E_s^{(j)}$ és F_0 segítségével. Ezt a kifejezést fogjuk általánosítani nem-egyensúlyra közelfekvően oly módon, hogy a $p_{s0}^{(j)} \rightarrow p_s^{(j)}$ helyettesítést végezzük el. Kapjuk tehát:

$$s_t = -k N_t \sum_{s,j} p_s^{(j)} \ln p_s^{(j)} = -k \sum_{s,j} n_s^{(j)} \ln \frac{n_s^{(j)}}{N_t} \quad (114)$$

ahol felhasználtuk a (100) összefüggést. Ezzel meghatároztuk a (113)-ban szereplő tagokat a koncentrációk függvényében. A (114) első része a „trapping statistics”-nél általánosabb, hiszen a trapping statistics valójában a (99), (100) azonosítást jelenti. (114) tulajdonképpen a nagy-kanonikus sokaság általánosítását jelenti nem-egyensúlyra (persze N_i sem kell, hogy szerepeljen). Ismeretünk szerint a nagy-kanonikus sokaság nem-egyensúlyi jellemzésének a betöltési valószínűségnek (101) alatti és ezekkel az entrópiának a (114) alatti kifejezése ezidáig nem lett megadva. Természetesen a fentiek segítségével a többi termodinamikai függvény is meghatározható. Így pl. a nagy-kanonikus eloszlás alapvető termodinamikai függvénye egyensúlyban: a táblázat szerint (ahol 0 indexeket kellett volna írni)

$$-p_0 V = -kT \ln \Theta_0$$

ahol Θ_0 a (98)-ban szereplő *statisztikus összeg*.

Nem-egyensúlyban nyilván kapjuk:

$$-pV = -kT \ln \Theta \quad (115)$$

ahol Θ -ban (101)-nek megfelelően a kvázi Fermi nívók (nem-egyensúlyi kémiai potenciálok is szerepelnek). Amennyiben a rendszer termikus kölcsönhatásra nézve sem tekinthető egyensúlyinak, úgy a további általánosítás útja a T helyébe egy nem egyensúlyi T^* bevezetése. Erre egyszerű példa lehet az ún. „forró elektronok” („hot electrons”) rekombinációja. A forró elektronok nincsenek termikus egyensúlyban a ráccsal, hőmérsékletük pl. egymással történő ütközések hatására áll be. Ilyenkor a tárgyalás az előzőkhöz hasonlóan végezhető, azzal a különbséggel, hogy most az elektronok és a rács között az energia átadás számottevő lehet és (101)-ben T^* írandó. Ezekben az egyenletekben nem használtuk ki a centrumok adta esetleges speciális feltételeket, ezek mindazon termodinamikai rendszerre vonatkoznak, amelyek anyagi és termikus kapcsolatban vannak a környezetükkel. Nem vizsgáljuk ennek a leírásnak más területen való alkalmazhatóságát és érvényességi körét. Különösen az utóbbi kívánna jelen munka célkitűzéseit jóval meghaladó vizsgálatokat.

A fenti kitérő után térjünk vissza a g meghatározásához. Idézzük a g -nek az általunk vizsgált esetre vonatkozó definícióját, pl.:

$$g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_t^{(j)}] = - \left(\frac{\partial^2 s(\alpha_n \dots \alpha_s^{(h)} \dots \alpha_t^{(j)} \dots \alpha_p)}{\partial \alpha_s^{(h)} \partial \alpha_t^{(j)}} \right)_0 \quad (116)$$

Természetesen a mátrixelemek között olyanok is előfordulnak, amelyben α_p vagy α_n szerint kell a differenciálást elvégezni. Mielőtt a számolást a definíció alapján elvégeznénk, emlékeznünk kell arra, hogy a szereplő változók nem függetlenek.

Egyrészt a $\sum_{s,j} p_s^{(j)} = 1$, másrészt az elektromos semlegesség feltétele is érvényes. Ezek lesznek most az ún. „zártági feltételek”. Ha az $n, n_s^{(j)}, p$ változókat használjuk, akkor az első feltételnek megfelelően:

$$\sum_{s,j} n_s^{(j)} = N_i \quad (117)$$

ami az α változóiban a következő alakú:

$$\sum_{s,j} \alpha_s^{(j)} = 0 \quad (118)$$

Megjegyzendő, hogy itt nem szerepel sem α_n , sem α_p . Az elektromos semlegesség feltételét a szokásos N_d ionizált donor, N_a ionizált akceptor feltételezése mellett írjuk fel. E feltételezés nem jelent elvi korlátozást, csupán azt jelenti, hogy az igen alacsony hőmérsékletek esetére külön kellene felírni az elektromos semlegesség feltételét. Bal oldalon a negatív, jobb oldalon a pozitív töltéseket írva kapjuk:

$$\sum_{s,j} s n_s^{(j)} + n + N_a = p + N_d \quad (119)$$

ami az α változókra a

$$\sum_{s,j} s \alpha_s^{(j)} + \alpha_n = \alpha_p \quad (120)$$

összefüggést adja.

A mátrixelemek elég hosszadalmas, de egyszerű számolás útján meghatározhatók, ha pl. (28), (29) alapján a megfelelő változókat elimináljuk. Egyszerűbben juthatunk célhoz, ha a közvetett függvény differenciálási szabályát felhasználva figyelembe vesszük, hogy ott, ahol $n_r^{(1)}$, vagy $n_{r+1}^{(1)}$ fellép a (28) szerint a többi változó is szerepel. Természetesen teljesen mindegy, hogy $n_s^{(j)}$, vagy $\alpha_s^{(j)}$ változó szerint számolunk, mert a (116) szerint úgyis egyensúlyban kell venni a deriváltak értékét. Mivel a (94) és (114) egyenletekben a koncentrációk szerepelnek, célszerű most is emellett maradni.

Képezzük most pl. a $g[n_s^{(h)}, n_t^{(j)}] \equiv g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_t^{(j)}]$ mátrixelemet. A (113) alapján az első derivált nyilván:

$$\frac{\partial s}{\partial n_s^{(h)}} = \frac{\partial s_t}{\partial n_s^{(h)}} + \frac{\partial s_t}{\partial n_r^{(1)}} \cdot \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} + \frac{\partial s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)}} \cdot \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}}$$

továbbá

$$\frac{\partial^2 s}{\partial n_t^{(j)} \partial n_s^{(h)}} = \frac{\partial^2 s_t}{\partial n_r^{(1)2}} \cdot \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} \cdot \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_t^{(j)}} + \frac{\partial^2 s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)2}} \cdot \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} \cdot \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_t^{(j)}}$$

A $\frac{\partial^2 s_t}{\partial n_r^{(1)2}}$ és $\frac{\partial^2 s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)2}}$ a (114) alapján egyszerűen adódik, nyilván:

$$\frac{\partial^2 s_t}{\partial n_r^{(1)2}} = -\frac{k}{n_r^{(1)}}; \quad \frac{\partial^2 s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)2}} = -\frac{k}{n_{r+1}^{(1)}} \quad (121)$$

A (28) egyenlet alapján kapjuk továbbá

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} &= (s-r-1); & \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} &= -(s-r) \\ \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_t^{(j)}} &= (t-r-1) & \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_t^{(j)}} &= -(t-r) \end{aligned}$$

A (116) definíció alapján kapjuk tehát:

$$g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_t^{(j)}] = k \left[\frac{(s-r-1)(t-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)(t-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (122)$$

p (122) ér vényes azon nem diagonális elemekre, melyek nem tartalmazznak n , illetve (vagy másképpen α_n, α_p) szerinti deriváltakat. Másrészt pl. az n -t tartalmazó

(nem diagonális) tagokra írhatjuk:

$$\frac{\partial s}{\partial n} = \frac{\partial s_n}{\partial n} + \frac{\partial s_t}{\partial n_r^{(1)}} \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n} + \frac{\partial s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)}} \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n}$$

$$\frac{\partial^2 s}{\partial n_s^{(h)} \partial n} = 0 + \frac{\partial^2 s_t}{\partial n_r^{(1)2}} \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n} \frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}} + \frac{\partial^2 s_t}{\partial n_{r+1}^{(1)2}} \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n} \frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n_s^{(h)}}$$

Figyelembe véve, hogy $\frac{\partial n_r^{(1)}}{\partial n} = +1$; $\frac{\partial n_{r+1}^{(1)}}{\partial n} = -1$, valamint a már előbb is használt kifejezéseket, kapjuk:

$$g[\alpha_n, \alpha_s^{(h)}] = k \left[\frac{(s-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (123)$$

A p -t tartalmazó nem diagonális elemekre teljesen hasonlóan kapjuk:

$$g[\alpha_p, \alpha_s^{(h)}] = -k \left[\frac{(s-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (124)$$

Az α_n és α_p -t tartalmazó nem diagonális elemekre

$$g[\alpha_n, \alpha_p] = -k \left[\frac{1}{n_{r0}^{(1)}} \frac{1}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (125)$$

Vizsgáljuk most a diagonális elemeket. Ezekre is az előző számolást alkalmazva a következőket kapjuk:

$$g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_s^{(h)}] = k \left[\frac{1}{n_{s0}^{(h)}} + \frac{(s-r-1)^2}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)^2}{n_{r+10}^{(1)}} \right]$$

$$g[\alpha_n, \alpha_n] = k \left[\frac{1}{n_0} + \frac{1}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{1}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (126)$$

$$g[\alpha_p, \alpha_p] = k \left[\frac{1}{p_0} + \frac{1}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{1}{n_{r+10}^{(1)}} \right]$$

A mátrixelemekre kapott előző kifejezések megadják a *szimmetrikus* g mátrix összes elemét. Ezek lényegesen tömörebb formában is felírhatók. Egyszerű meggyőződni, hogy a mátrixelemek így írhatók fel:

$$g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_t^{(j)}] = k \left[\frac{\delta_{st} \delta_{hj}}{n_{s0}^{(h)}} + \frac{(s-r-1)(t-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)(t-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right]$$

$$g[\alpha_n, \alpha_s^{(h)}] = -g[\alpha_p, \alpha_s^{(h)}] = k \left[\frac{(s-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{(s-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (127)$$

$$g[\alpha_i, \alpha_j] = -k \left[\frac{\delta_{ij}}{i_0} + \frac{1}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{1}{n_{r+10}^{(1)}} \right] (-1)^{\delta_{ij}}$$

($i, j = n, p$)

Ezzel explicite megadtuk a vizsgált rendszer entrópia-mátrixát az egyensúlyi koncentrációk függvényében.

Térjünk most rá az általános termodinamikai erők meghatározására. Ehhez elegendő az (51) definíciót használni, figyelembe véve a g -re adott (127), valamint a (108) és (112) összefüggéseket. Mindenek előtt állapodjunk meg az α_i változóknak egy tetszőleges, de rögzített sorrendjében. Legyen ez a következő:

$$\alpha \equiv \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \alpha_M^{(jM)} \\ \vdots \\ \alpha_s^{(j)} \\ \vdots \\ \alpha_0^{(1)} \\ \alpha_p \end{pmatrix}$$

Természetesen az $\alpha_r^{(1)}$ és $\alpha_{r+1}^{(1)}$ változók nem szerepelnek. Például az $X_{\alpha_s^{(h)}}$ általános erő a (49) alapján

$$X_{\alpha_s^{(h)}} = -\{g[\alpha_n, \alpha_s^{(h)}]\alpha_n + \sum_{i,j}'' g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_i^{(j)}]\alpha_i^{(j)} + g[\alpha_s^{(h)}, \alpha_p]\alpha_p\}$$

A (127) kifejezések segítségével írhatjuk:

$$\begin{aligned} X_{\alpha_s^{(h)}} &= -k \left\{ \left(\frac{s-r-1}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{s-r}{n_{r+10}^{(1)}} \right) \alpha_n + \sum_{i,j}'' \left[\frac{\delta_{st} \delta_{hj}}{n_{s0}^{(h)}} + \frac{(s-r-1)(t-r-1)}{n_{r0}^{(1)}} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(s-r)(t-r)}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \alpha_i^{(j)} - \left(\frac{s-r-1}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{s-r}{n_{r+10}^{(1)}} \right) \alpha_p \right\} = \\ &= -k \left\{ [\alpha_n - \alpha_p + \sum_{i,j}'' (t-s-1) \alpha_i^{(j)}] \frac{s-r-1}{n_{r0}^{(1)}} + [\alpha_n - \alpha_p + \sum_{i,j}'' (t-r) \alpha_i^{(j)}] \frac{(s-r)}{n_{r+10}^{(1)}} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i,j}'' \frac{\delta_{st} \delta_{hj}}{n_{s0}^{(h)}} \alpha_i^{(j)} \right\} \end{aligned}$$

és ha itt figyelembe vesszük a (29) összefüggéseket, kapjuk:

$$X_{\alpha_s^{(h)}} = -k \left\{ \frac{\alpha_s^{(h)}}{n_s^{(h)}} + \frac{s-r-1}{n_{r0}^{(1)}} \alpha_r^{(1)} - \frac{s-r}{n_{r+10}^{(1)}} \alpha_{r+1}^{(1)} \right\} \quad (128a)$$

Teljesen hasonló számítás mutatja, hogy

$$X_{\alpha_n} = -k \left[\frac{\alpha_n}{n_0} + \frac{\alpha_r^{(1)}}{n_{r0}^{(1)}} - \frac{\alpha_{r+1}^{(1)}}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (128b)$$

$$X_{\alpha_p} = -k \left[\frac{\alpha_p}{p_0} - \frac{\alpha_r^{(1)}}{n_{r0}^{(1)}} + \frac{\alpha_{r+1}^{(1)}}{n_{r+10}^{(1)}} \right] \quad (128c)$$

Az így megadott erők azonban még nem az intenzív mennyiségek, a Fermi nívók (kémiai potenciálok) egyensúlytól való eltéréseivel vannak kifejezve. Ezt a (108) és

(112) segítségével tehetjük meg. Például az $X_{\alpha_s^{(h)}}$ erő esetében

$$\begin{aligned} X_{\alpha_s^{(h)}} &= -k \left[\frac{\alpha_s^{(h)}}{n_{s0}^{(h)}} + \frac{s-r-1}{n_{r+10}^{(1)}} \alpha_r^{(1)} - \frac{s-r}{n_{r0}^{(1)}} \alpha_{r+1}^{(1)} \right] = \\ &= -k \left\{ s \frac{dF_s^{(h)}}{kT} - \frac{d\Theta}{\Theta_0} + (s-r-1) \left(r \frac{dF_r^{(1)}}{kT} - \frac{d\Theta}{\Theta_0} \right) - \right. \\ &\quad \left. - (s-r) \left[(r+1) \frac{dF_{r+1}^{(1)}}{kT} - \frac{d\Theta}{\Theta_0} \right] \right\} = \\ &= -k \left[s \frac{dF_s^{(h)}}{kT} + (s-r-1) r \frac{dF_r^{(1)}}{kT} - (s-r)(r+1) \frac{dF_{r+1}^{(1)}}{kT} \right] \end{aligned}$$

Ahonnán végül az $X_{\alpha_s^{(h)}}$ -ra kapjuk:

$$X_{\alpha_s^{(h)}} = -\frac{1}{T} [s dF_s^{(h)} + (s-r-1)r dF_r^{(1)} - (s-r)(r+1) dF_{r+1}^{(1)}] \quad (129)$$

és hasonlóan:

$$X_{\alpha_n} = \frac{1}{T} [dF_n + r dF_r^{(1)} - (r+1) dF_{r+1}^{(1)}] \quad (130)$$

$$X_{\alpha_p} = \frac{1}{T} [dF_p - r dF_r^{(1)} + (r+1) dF_{r+1}^{(1)}] \quad (131)$$

Mielőtt e pontot lezárnánk, érdemes néhány megjegyzést tenni az általános erők (129–131) kifejezésére vonatkozóan. Ha összehasonlítjuk az említett formulákat a *Van Vliet* által használt (87) általános erőkkel, úgy feltűnik, hogy nála a futó indexű F_i mellett *egyetlen* rögzített F_s szerepel, míg nálunk az $F_s^{(j)}$ mellett két kvázi Fermi nivó: $F_r^{(1)}$, $F_{r+1}^{(1)}$ lép fel. Ez onnan ered, hogy nála egyetlen mellékfeltétel volt a (86), míg nálunk a (118) és (120) szerepelnek. További különbség, hogy nálunk az s, r stb. indexek explicite fellépnek. Azt gondolhatnánk, hogy ez onnan származik, hogy nem választottuk meg szerencsésen az $\alpha_s^{(j)}$ változókat és pl. az $\bar{\alpha}_s^{(j)} \equiv \alpha_s^{(j)}$ [$s > 0$ és $\alpha_0^{(j)} \equiv \bar{\alpha}_0^{(j)}$] választás természetesebb, hiszen ez a *tényleges elektron koncentrációt* (és nem az $[s, j]$ állapotban levő centrumoknak számát) jelentené. Sajnos azonban a (118) és (120) feltételek olyanok, hogy az egyik számára az $\alpha_s^{(j)}$, a másik számára az $\bar{\alpha}_s^{(j)}$ változó a „természetes”, s így az s, r stb. mindenképpen fellép. Az általunk választott változóknak meg van az az előnye, hogy az s szorzóként szerepel, ellenkező választásnál (118) nevezőjében jelenne meg egy s , ami miatt az $s=0$ esetet a szummától külön kéne kezelni.

Az általános erők (129)–(131)-ben megadott kifejezései mutatják, hogy bonyolult rendszerek esetén nem lehet egyszerűen „megjósolni” az általános termodinamikai erőknek és az intenzív mennyiségeknek a kapcsolatát. Ilyen esetekben már nincs meg az általános erők *közvetlenül* szemléletes jelentése, jóllehet azt továbbra is lehet mondani, hogy az általános erők az intenzív mennyiségek (jelen esetben kémiai potenciálok) egyensúlytól való eltéréseiből konstruálhatók.

10. Alkalmazások

a) *Rzsanov modellje*

Az általános elméletet most arra a speciális modellre alkalmazzuk, melyet elsőnek (stacioner esetre) *A. V. Rzsanov* (1962) vizsgált, s melyet a szerző nem stacioner esetben egy közelmúltban megjelent dolgozatában tárgyalt (*Acta Physica* 1963). A centrumoknak két töltésállapotát tételezzük fel s és $s+1$ és mindegyik töltésállapotnak az alapállapoton kívül egy gerjesztett nívója van. Legyen az egyes nívók jellemzői (*A. V. Rzsanov*, valamint az említett dolgozatunk jelöléseit használva)

$$\begin{aligned} [s, 1] &\rightarrow E_s^{(1)} N_t^*; & [s, 2] &\rightarrow E_s^{(2)} N_t^{**}; \\ [s+1, 1] &\rightarrow E_{s+1}^{(1)} n_t; & [s+1, 2] &\rightarrow E_{s+1}^{(2)} n_t^* \end{aligned} \quad (132)$$

A modell alapvető feltevése, hogy a rekombináció csak a centrum gerjesztett nívóin mehet végbe, azaz $E_s^{(2)}$ és $E_{s+1}^{(2)}$ állapoton keresztül; éspedig az elektronbefogás az $[s, 1] \rightarrow [s+1, 2]$, a lyuk befogás az $[s+1, 1] \rightarrow [s, 2]$ átmenetnek megfelelően. A teljes rekombinációs processzus ezek szerint a következő lesz:

$$[s, 1] \rightarrow [s+1, 2] \rightarrow [s+1, 1] \rightarrow [s, 2] \rightarrow [s, 1].$$

Az A mátrix és az élettartamok meghatározása

A független változóknak az n , n_t^* , N_t^{**} és p koncentrációkat válasszuk. Ez megfelel az általános tárgyalás választásának, ahol két egymást követő töltésállapotban (r és $r+1$), az alapállapotok koncentrációit küszöböltük ki a mellékfeltételek segítségével. A vizsgált konkrét modell szerint a sávokból a befogás csak a gerjesztett nívóra történhet, azaz $[s, 1] \rightarrow [s+1, 2]$; $[s+1, 1] \rightarrow [s, 2]$.

Ugyanakkor Nagae feltevése szerint egy centrum gerjesztett állapotban nem fog be sem elektront, sem lyukat (lásd (20) egyenlet). Ez esetünkben azt jelenti, hogy pl. az $[s+1, 2] \rightarrow [s, 1]$, $[s, 2] \rightarrow [s+1, 1]$ átmenetek elhanyagolhatók. Ezek alapján csak az

$$[s, 1] \rightarrow [s+1, 2]; \quad [s+1, 2] \rightarrow [s+1, 1]$$

$$[s+1, 1] \rightarrow [s, 2]; \quad [s, 2] \rightarrow [s, 1]$$

átmenetek lépnek fel. Kapjuk tehát a (24), (30), (31) egyenletek alapján

$$\begin{aligned} \frac{dn}{dt} &= -U_{s+1,2}^{s,1}(n) \\ \frac{dn_t^*}{dt} &= +U_{s+1,2}^{s,1}(n) - U_{s+1,1}^{s+1,2} \\ \frac{dN_t^{**}}{dt} &= +U_{s,2}^{s+1,1}(p) - U_{s,1}^{s,2} \\ \frac{dp}{dt} &= -U_{s,2}^{s+1,1}(p) \end{aligned} \quad (133)$$

A linearizált egyenletekből, a mellékfeltételek (27) és (33) alapján némi átalakítás után az A mátrixra adódik

$$A = \begin{pmatrix} (1 + \alpha') A_n; & -A_n \frac{n_1^*}{n_0}; & -A_n; & -A_n \\ \left[-A_n(1 + \alpha') + r_n \frac{n_1}{n_1^*} \right]; & \left[A_n \frac{n_1^*}{n_0} + r_n \left(1 + \frac{n_1}{n_1^*} \right) \right]; & +A_n; & \left[A_n - r_n \frac{n_1}{n_1^*} \right] \\ \left[A_p - r_p \frac{p_1}{p_1^{**}} \right]; & A_p; & \left[A_p \frac{p_1^{**}}{p_0} + r_p \left(1 + \frac{p_1}{p_1^{**}} \right) \right]; & \left[-A_p(1 + \beta') + r_p \frac{p_1}{p_1^{**}} \right] \\ -A_p; & -A_p; & -A_p \frac{p_1^{**}}{p_0}; & A_p(1 + \beta') \end{pmatrix} \quad (134)$$

Itt bevezettük a következő jelöléseket:

$$n_1^* \equiv n_0 \Gamma_{s+1,2}^{s,1} = n_0 \frac{N_{t0}^*}{n_{t0}^*} \quad p_1^{**} \equiv p_0 \Gamma_{s,2}^{s+1,1} = p_0 \frac{n_{t0}}{N_{t0}^{**}}$$

$$n_1 \equiv n_0 \frac{N_{t0}^*}{n_{t0}^*}; \quad p_1 \equiv p_0 \frac{n_{t0}}{N_{t0}^*}; \quad \alpha' \equiv \frac{N_{t0}^*}{n_0}; \quad \beta' = \frac{n_{t0}}{p_0}; \quad A_n \equiv C_n n_0; \quad A_p \equiv C_p p_0.$$

Ezzel a rendszer g és A mátrixa ismert. Az L mátrixot az $L = Ag^{-1}$ alapján meghatározhatjuk. Egyszerű, de hosszadalmas számítás mutatja, hogy L alakja:

$$L = \begin{pmatrix} L_n; & -L_n; & 0; & 0 \\ -L_n; & L_n + l_n; & 0; & 0 \\ 0; & 0; & L_p + l_p; & -L_p \\ 0; & 0; & -L_p; & L_p \end{pmatrix} \quad (135)$$

ahol

$$L_n = \frac{C_n n_0 N_{t0}^*}{k}; \quad l_n = \frac{r_n n_{t0}^*}{k}; \quad L_p = \frac{C_p p_0 n_{t0}}{k}; \quad l_p = \frac{r_p N_{t0}^{**}}{k}.$$

Világos, hogy a kísérleti összevetés számára akár a rekombinációs folyamat élet-tartamáról, akár a zaj-spektrumról van szó, szükség van az A mátrix karakterisztikus egyenleteinek gyökeire. Esetünkben ez egy negyedfokú egyenlet megoldását jelenti. Jóllehet, a negyedfokú egyenlet explicite megoldható, mégis az áttekinthetőség és a könnyebb fizikai értelmezés érdekében közelítéssel fogunk élni. A megoldandó egyenlet:

$$b_0 \tau^4 + b_1 \tau^3 + b_2 \tau^2 + b_3 \tau + b_4 = 0 \quad (136)$$

ahol

$$b_0 = A_n A_p r_n r_p \left[\alpha' \left(1 + \frac{p_1}{p_0} \right) + \beta' \left(1 + \frac{n_1}{n_0} \right) + \alpha' \beta' \right]$$

$$b_1 = -r_n r_p \left[A_n \left(1 + \alpha' + \frac{n_1}{n_0} \right) (1 + \delta) A_p \left(1 + \beta' + \frac{p_1}{p_0} \right) (1 + \varepsilon) \right] \quad (137)$$

$$b_2 = r_n r_p (1 + \varepsilon) (1 + \delta)$$

$$b_3 = - \left[A_n \left(1 + \alpha' + \frac{n_1^*}{n_0} \right) + A_p \left(1 + \beta' + \frac{p_1^{**}}{p_0} \right) + r_n + r_p \right]$$

$$b_4 = +1$$

és itt

$$\varepsilon \equiv \frac{C_n n_1^*}{r_n}, \quad \delta \equiv \frac{C_p p_1^{**}}{r_p} \quad (138)$$

A közelítő megoldásnál abból indulunk ki, hogy fizikailag eleve várható, hogy a gyökök (az élettartamok) lényegesen különböznek egymástól. Pontosabban

$$\tau_1 \gg \tau_2 \gg \tau_3, \tau_4$$

vagyis az első két élettartam τ_1 és τ_2 (továbbiakban τ_r, τ_t) egymástól és a τ_3, τ_4 -től lényegesen eltér, míg a τ_3 és τ_4 összemérhető. Ezért legalábbis a τ_r és τ_t -nél alkalmazható az a közelítés, amely szerint, ha $\tau_1 \gg \tau_2 \gg \tau_3 \gg \tau_4$, akkor

$$\tau_i \approx -\frac{b_i}{b_{i-1}} \quad (139)$$

Ezek alapján, hosszabb átalakítások után

$$\tau_r = \frac{C_n \left[n_0 + n_1 + N_t \left(1 + \frac{p_1}{p_0} \right)^{-1} \right] (1 + \delta) + C_p \left[p_0 + p_1 + N_t \left(1 + \frac{n_1}{n_0} \right)^{-1} \right] (1 + \varepsilon)}{N_t C_n C_p \left[n_0 + p_0 + N_t \left(1 + \frac{p_1}{p_0} \right)^{-1} \left(1 + \frac{n_1}{n_0} \right)^{-1} \right]} \quad (140)$$

$$\tau_t = \frac{(1 + \varepsilon) (1 + \delta)}{C_n \left[n_0 + n_1 + N_t \left(1 + \frac{p_1}{p_0} \right)^{-1} \right] (1 + \delta) + C_p \left[p_0 + p_1 + N_t \left(1 + \frac{n_1}{n_0} \right)^{-1} \right] (1 + \varepsilon)} \quad (141)$$

Kis N_t -knél ($N_t \ll n_0, p_0, n_1, p_1$) kapjuk

$$\tau_r = \frac{C_n (n_0 + n_1) (1 + \delta) + C_p (p_0 + p_1) (1 + \varepsilon)}{N_t C_n C_p (n_0 + p_0)} \quad (142)$$

$$\tau_t = \frac{(1 + \varepsilon) (1 + \delta)}{C_n (n_0 + n_1) (1 + \delta) + C_p (p_0 + p_1) (1 + \varepsilon)} \quad (143)$$

A másik két gyökről nem tehetjük fel, hogy lényegesen különböznek egymástól, mert mindkettő belső átmenetet jellemez: $[s+1, 2] \rightarrow [s+1, 1]$ és $[s, 2] \rightarrow [s, 1]$ és így egy nagyságrendben lehetnek. Ezért úgy járunk el, hogy a negyedfokú egyenlet helyett a

$$b_2\tau^2 + b_3\tau + b_4 = 0$$

egyenletet oldjuk meg.

A b_3 -at egyszerűen átalakíthatjuk, ha figyelembe vesszük, hogy általában

$$1 + \alpha' \ll \frac{n_1^*}{n_0} \quad \text{és} \quad 1 + \beta' \ll \frac{p_1^{**}}{p_0}$$

ami abból következik, hogy $\mathcal{E}_t^*, \mathcal{E}_t^{**}$ (ezek definícióját lásd következő pontban) igen közel van a vezetési, illetve valencia-sávokhoz, azaz nem nagyon extrinsic félvezetőben az n_1^*, p_1^{**} jóval nagyobb n_0 , illetve p_0 -nál. (n_1^*, p_1^{**} azt az elektron, illetve lyuk koncentrációt jelenti, mely akkor állna elő, ha a Fermi nívó F_0, \mathcal{E}_t^* , illetve \mathcal{E}_t^{**} -gal egyezne meg.)

Ezek alapján írhatjuk

$$b_3 = r_n(1 + \varepsilon) + r_p(1 + \delta)$$

és így a gyökök, azaz a belső átmenetek élettartamaira kapjuk:

$$\tau_3 \approx \frac{1}{r_p(1 + \delta)}, \quad \tau_4 \approx \frac{1}{r_n(1 + \varepsilon)} \quad (144)$$

Ezzel mind a négy élettartamot, a karakterisztikus egyenlet mind a négy gyökét közelítőleg megadtuk.

Az élettartamokra kapott fenti kifejezésekből néhány érdekes következtetést lehet levonni. Mindenek előtt a (142)–(143) formulákba bevezethetjük a

$$C'_n \equiv \frac{C_n}{1 + \varepsilon}; \quad C'_p \equiv \frac{C_p}{1 + \delta} \quad (145)$$

effektív befogási állandókat, amivel τ_r -re és τ_t -re kapott kifejezések formailag meg-egyeznek a gerjesztett nívók nélkül végbemenő rekombináció élettartamaival. Ez azt jelenti, hogy a ténylegesen mérhető τ_r és τ_t -ben szereplő C'_n és C'_p -kbe belemérjük a belső átmenetek hatását is. Nem elegendő tehát az élettartam meghatározásánál egyedül a *sávból való befogást figyelembe venni*, hanem az első gerjesztett nívóról az alapállapotba való *belső átmenet* (r_n, r_p) számításbavétele is szükséges. Mivel azonban az első gerjesztett nívó kT -hez képest általában nagy, így gondoskodni kell egy — vagy több — fononos, esetleg új rekombinációs mechanizmus feltételezésével az elektron energiájának leadásáról.

A C_n, C_p meghatározásánál M. Lax, mint említettük abból indult ki, hogy a nívók elég közel vannak egymáshoz a vizsgált hőmérsékleten levő kT -hez képest, azaz egy fononos átmenetek lehetségesek. Azonban most látjuk, hogy még akkor is, ha feltesszük ezen gerjesztett nívók létezését, (ez *Boncs—Bruevics és Glasko* munkája óta elég kérdéses) még ekkor is az utolsó lépés limitálja a rekombináció sebességét és az élettartam meghatározásában fontos szerepet kap. Az elmélet közvetlen kísérleti ellenőrzésénél a problémát az effektív befogási állandók fellépése jelenti.

Közvetlen élettartam-mérésekkel ugyanis nehéz elképzelni a C_n és r_n , illetve C_p és r_p szétválasztását, hiszen mindig a C'_n és C'_p lép fel. A τ_3 és τ_4 10^{-8} – 10^{-9} sec rendűek, ezeknek mérése ma még kérdéses. A fentiekből várható, hogy bonyolultabb modell (több töltésállapot $M \geq 2$; és több gerjesztett nívó $h \geq 2$) esetében is nemcsak a stationer élettartam, amint azt M. Nagae megmutatta, hanem a tranzien élettartam is ún. effektív befogási állandók bevezetésével tárgyalhatók. A ténylegesen mérhető élettartamokat a leglassúbb folyamat fogja megszabni, így az élettartam hőmérséklet-függésének meghatározásával ennek a folyamatnak kell megtalálni a helyes mechanizmusát. Ez azonban ma még nagyrészt nyitott kérdésnek mondható.

Betöltöttség nem-egyensúlyi és egyensúlyi állapotban

Az előzőek szerint a „trapping statistics” alkalmazásával nyerhetjük a nem-egyensúlyi betöltöttséget, ha minden $[s, j]$ állapothoz egy $F_s^{(j)}$ kvázi Fermi nívót rendelünk. A (100) formula és a (132) jelölések alapján írhatjuk:

$$\frac{n_t}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{(s+1)F_{n_t} - E_{s+2}^{(1)}}{kT} \right]}{\Theta}, \quad \frac{n_t^*}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{(s+1)F_{n_t^*} - E_{s+1}^{(2)}}{kT} \right]}{\Theta}$$

$$\frac{N_t^*}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{sF_{N_t^*} - E_s^{(1)}}{kT} \right]}{\Theta}, \quad \frac{N_t^{**}}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{sF_{N_t^{**}} - E_s^{(2)}}{kT} \right]}{\Theta}$$

ahol a Θ nem-egyensúlyi állapot-összeg:

$$\Theta = \exp \left(\frac{sF_{N_t^*} - E_s^{(1)}}{kT} \right) + \exp \left(\frac{sF_{N_t^{**}} - E_s^{(2)}}{kT} \right) + \exp \left(\frac{(s+1)F_{n_t} - E_{s+1}^{(1)}}{kT} \right) +$$

$$+ \exp \left(\frac{(s+1)F_{n_t^*} - E_{s+1}^{(2)}}{kT} \right)$$

Ezekből az egyensúlyi betöltöttséget azonnal felírhatjuk, ha az összes $F_s^{(j)}$ helyébe F_0 -t írunk. Kapjuk

$$\frac{n_{t0}}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{(s+1)F_0 - E_{s+1}^{(1)}}{kT} \right]}{\Theta_0}, \quad \frac{n_{t0}^*}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{(s+1)F_0 - E_{s+1}^{(2)}}{kT} \right]}{\Theta_0}$$

$$\frac{N_{t0}^*}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{sF_0 - E_s^{(1)}}{kT} \right]}{\Theta_0}, \quad \frac{N_{t0}^{**}}{N_t} = \frac{\exp \left[\frac{sF_0 - E_s^{(2)}}{kT} \right]}{\Theta_0}$$

A Θ_0 egyszerűen átalakítható:

$$\Theta_0 = \exp \frac{sF_0}{kT} Z_s + \exp \left[\frac{(s+1)F_0}{kT} \right] Z_{s+1}$$

ahol

$$Z_s \equiv \exp\left(-\frac{E_s^{(1)}}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{E_s^{(2)}}{kT}\right); \quad Z_{s+1} \equiv \exp\left(-\frac{E_{s+1}^{(1)}}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{E_{s+1}^{(2)}}{kT}\right)$$

Itt szokásos a kifejezések formális egyszerűsítése végett új energia nivókat bevezetni, melyek függenek a hőmérséklettől és nincs külön fizikai értelmük, azaz nem várható, hogy ezek a nivók abszorpcióban, vagy emisszióban ténylegesen megjelenjenek. Legyen tehát \mathcal{E}_t , \mathcal{E}_t^* és \mathcal{E}_t^{**} a következő egyenletekkel definiálva:

$$\frac{Z_s}{Z_{s+1}} \equiv \exp\left(\frac{\mathcal{E}_t}{kT}\right); \quad \exp\left(-\frac{E_{s+1}^{(1)}}{kT}\right) / Z_s \equiv \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_t^*}{kT}\right);$$

$$\exp\left(-\frac{E_s^{(2)}}{kT}\right) / Z_{s+1} \equiv \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_t^{**}}{kT}\right)$$

Ekkor a következő összefüggések adódnak:

$$\frac{n_{t0}}{N_t} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\mathcal{E}_t - \mathcal{E}_t^*}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E}_t - F_0}{kT}\right)}; \quad \frac{n_{t0}^*}{N_t} = \frac{\exp\left(\frac{\mathcal{E}_t - \mathcal{E}_t^*}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E}_t - F_0}{kT}\right)}$$

$$\frac{N_{t0}^*}{N_t} = \frac{1 - \exp\left(\frac{\mathcal{E}_t^{**} - \mathcal{E}_t}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{F_0 - \mathcal{E}_t}{kT}\right)}; \quad \frac{N_{t0}^{**}}{N_t} = \frac{\exp\left(\frac{\mathcal{E}_t^{**} - \mathcal{E}_t}{kT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{F_0 - \mathcal{E}_t}{kT}\right)}$$

Szükséges megjegyezni, hogy teljesen hamis eredményhez vezet, ha a nem-egyensúlyi koncentrációkat az egyensúlyra vonatkozó fenti összefüggésekből származtatnánk $F_0 \rightarrow F_s^{(j)}$ helyettesítéssel. Ekkor ugyanis ki lehetne fejezni minden $\alpha_s^{(j)} \equiv n_s^{(j)} - n_{s0}^{(j)}$ -t, mint a saját kvázi Fermi nivójának $dF_s^{(j)}$ függvényeként. E helyett (108) egyenletet kell alkalmazni.

A g mátrix és a zaj-spektrum meghatározása

A 9. pontban általánosan megadtuk a g mátrix elemeit. Itt más feladat nincs, mint az ott kapott formulák alkalmazása. Egyszerű számítás mutatja, ha a független változóknak az $\tilde{\alpha} = (\delta n, \delta n_t^*, \delta N_t^{**}, \delta p)$ -ket válasszuk, akkor a g -re kapjuk:

$$g = k \begin{pmatrix} \frac{1}{n_0} + \frac{1}{n_{t0}} + \frac{1}{N_{t0}^*}; & +\frac{1}{n_{t0}}; & -\frac{1}{N_{t0}^*}; & -\left(\frac{1}{n_{t0}} + \frac{1}{N_{t0}^*}\right) \\ & +\frac{1}{n_{t0}}; & \frac{1}{n_{t0}^*} + \frac{1}{n_{t0}}; & 0; & -\frac{1}{n_{t0}} \\ & -\frac{1}{N_{t0}^*}; & 0; & \frac{1}{N_{t0}^{**}} + \frac{1}{N_{t0}^*}; & +\frac{1}{N_{t0}^*} \\ & -\left(\frac{1}{n_{t0}} + \frac{1}{N_{t0}^*}\right); & -\frac{1}{n_{t0}}; & \frac{1}{N_{t0}^*}; & \frac{1}{p_0} + \frac{1}{n_{t0}} + \frac{1}{N_{t0}^*} \end{pmatrix} \quad (146)$$

Az általános erők igen egyszerűen nyerhetők a (128)–(131) formulák alkalmazásával.

Az előzőekben megadott g mátrix, A mátrix és az A mátrix karakterisztikus egyenleteinek gyökei ismeretében (jóllehet azok csak közelítő gyökök) a fenti egyszerű modellben a $g-r$ zaj spektrális eloszlása felírható. Mivel A negyedrendű mátrix az $(AI-8)$, $(AI-9)$ és $(AI-10)$ formulák használandók. A zaj spektrumot a Green–Callen theoremá adja. A (83) vagy $(AII-9)$ alapján írhatjuk

$$G(\alpha, f) = 4k (A^2 + \omega^2)^{-1} A g^{-1}.$$

Látható, hogy az $f(x)$ függvény szerepét most az egyszerű $f(x) = \frac{x}{x^2 + \omega^2}$ függvény játssza, írhatjuk tehát:

$$G(\alpha, f) = 4k \left[\frac{\tau_r}{1 + \omega^2 \tau_r^2} L_r(A) + \frac{\tau_t}{1 + \omega^2 \tau_t^2} L_t(A) + \right. \\ \left. + \frac{\tau_3}{1 + \omega^2 \tau_3^2} L_3(A) + \frac{\tau_4}{1 + \omega^2 \tau_4^2} L_4(A) \right] g^{-1}$$

ahol az $L_i(x)$ alappolinomok az $(AI-9)$ -ben vannak megadva, az A és g mátrixokat a (132), illetve (134) egyenletek adják meg, míg az élettartamok közelítő értékeit a (142), (143) és (144)-ben adtuk meg. Mivel $G(\alpha, f)$ az $\langle \alpha_i, \alpha_j \rangle$ mennyiségek fluktuációjának spektrális eloszlását adja, mátrix írásmódban (lásd (95) egyenletet) és esetünkben az α vektor elemei δn , δn_i^* , δN_i^{**} és δp a kísérletekhez szükséges $\langle \delta n \delta n \rangle$, $\langle \delta n \delta p \rangle$ és $\langle \delta p \delta p \rangle$ mennyiségek frekvenciafüggését (a G_{nn} , G_{np} , G_{pp} elemeket) a fenti kifejezésekből leolvashatjuk, s a (95)-be téve az áram G_i rekombinációból eredő zaját megkaphatjuk. Amennyiben a vizsgált anyagban nincs egyéb zaj-forrás (pl. $p-n$ átmenet), úgy a zaj a fentiekből számolható. Látható, hogy a τ_3 , τ_4 élettartamok megjelenése a frekvencia menetben csak a nagyfrekvenciás részben hoz változást, hiszen csak $\omega \gg \frac{1}{\tau_3}$, $\omega \gg \frac{1}{\tau_4}$ -nél kap a harmadik, illetve negyedik tag szerepet. Kis frekvenciákon ezek járuléka egy konstans. Mivel nagyságrendileg $\tau_r \sim 10^{-5}$ sec, $\tau_t \sim 10^{-7}$ sec, τ_3 , τ_4 közel 10^{-8} sec (szobahőmérsékleten), csak a 10^8 Hz-es frekvencia tartományban hoz változást a τ_3 , τ_4 fellépése.

b) Rekombináció stacioner állapothoz

Mindezidáig feltettük, hogy a rendszer a perturbáció után a termodinamikai egyensúlyhoz áll vissza. Felmerül azonban a kérdés, hogy milyen lesz a rekombináció folyamata, ha $t \rightarrow \infty$ esetén pl. egy stacioner nem-egyensúlyi állapotba jutunk vissza. Ez a probléma a kísérlet számára egyszerűen megvalósítható, hiszen pl. egy félvezető mintát állandóan megvilágítva, beáll a nívók egy stacioner betöltöttsége, s ha ezt a rendszert egy további perturbációnak tesszük ki, akkor a rendszer stacioner állapothoz tér vissza. (Feltesszük természetesen, hogy a stacioner állapot stabilis.)

A továbbiakban feltesszük, hogy a stacioner állapot nincs túl messze az egyensúlytól, azaz a befogási állandók az egyensúlyi befogási állandókkal azonosíthatók.

Mivel a stacioner állapot csak a külső generációk figyelembevételével valósítható meg (lásd az 5. pont; kényszer folyamatok tárgyalása) a feladatot leíró egyenleteknél a $G(t)$ figyelembe veendő.

Az előző pont jelöléseit véve alapul most csupán az $[s, 1] \xrightarrow{\text{el. bef.}} [s+1, 1]$ és $[s+1, 1] \xrightarrow{\text{lyuk. bef.}} [s, 1]$ átmeneteket fogjuk figyelembe venni, azaz egyszerű $S-R$ modellt vizsgálunk.

További feltevés az, hogy a centrum alapállapotban semleges, azaz $s=0$. Jelölje továbbá

$$n_0^{(1)} \equiv p_t; \quad n_1^{(1)} \equiv n_t$$

a $[0, 1]$ és $[1, 1]$ állapotú centrumok koncentrációját. Akkor:

$$\frac{dn}{dt} = -U_{11}^{0,1}(n) + G_0; \quad \frac{dp}{dt} = -U_{01}^{1,1}(p) + G_0$$

ahol feltettük, hogy az elektronok és a lyukak generációja egyenlő és időben állandó.

A szereplő tiszta befogási sebességek azonosíthatók a 2. pont (5) és (7) egyenletével, kapjuk tehát:

$$\frac{dn}{dt} = -C_n(np_t - n_1n_t) + G_0 \quad (147)$$

$$\frac{dp}{dt} = -C_p(pn_t - p_1p_t) + G_0$$

További feltételeket a (117) és (119) egyenletek alkalmazásával nyerünk:

$$n_t + p_t = N_t \quad (148a)$$

$$n_t + n + N_a = p + N_d \quad (148b)$$

A stacioner állapot paramétereit; az n_s, p_s, n_{ts}, p_{ts} mennyiségeket, a G_0 segítségével változtatjuk. Mivel azonban az n_s és p_s mérhetők könnyebben, ezeket tekintjük független változóknak. Stacioner állapotban $\frac{dn}{dt}, \frac{dp}{dt}$ zérusok, így (az „s” indexet bevezetve):

$$-C_n n_s p_{ts} + C_n n_1 n_{ts} + G_0 = 0 \quad (149a)$$

$$-C_p p_s n_{ts} + C_p p_1 p_{ts} + G_0 = 0 \quad (149b)$$

$$n_{ts} + p_{ts} = N_t \quad (149c)$$

A (148a) és (149b)-ből G_0 eliminálható és (149c) segítségével n_{ts} és p_{ts} -re kapjuk

$$n_{ts} = \frac{N_t(C_n n_s + C_p p_1)}{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)}; \quad p_{ts} = \frac{N_t(C_p p_s + C_n n_1)}{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)} \quad (150)$$

A G_0 értéke is természetesen kifejezhető az n_s és p_s segítségével. Egyszerű számítás adja:

$$G_0 = \frac{C_n C_p N_t (n_s p_s - n_1 p_1)}{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)} \quad (151)$$

Megjegyezzük, hogy ezen összefüggések levezetésénél nem használtuk az elektromos semlegességet kifejező (148b) egyenletet, továbbá, hogy amint várjuk $n_s = n_0$, $p_s = p_0$ esetén $G_0 = 0$, mivel $n_0 p_0 = n_1 p_1 = n_1^2$. (Lásd (7) egyenletet követő megjegyzést.)

A továbbiakban az így meghatározott stacioner állapotot fogjuk kezdeti feltételnek tekinteni és e körül fogjuk sorba fejteni a (147) egyenleteket. Legyen:

$$n = n_s + \delta n; \quad p = p_s + \delta p$$

$$n_t = n_{ts} + \delta n_t; \quad p_t = p_{ts} + \delta p_t$$

A két mellékfeltétel a (148a) és (148b) stacioner állapottól való eltérésekre a következő összefüggéseket adja:

$$\delta n_t + \delta p_t = 0$$

$$\delta n_t + \delta n = \delta p$$

Így:

$$\frac{d\delta n}{dt} = -C_n(n_s + p_{ts} + n_1)\delta n + C_n(n_s + n_1)\delta p$$

$$\frac{d\delta p}{dt} = +C_p(p_s + p_1)\delta n - C_p(p_s + n_{ts} + p_1)\delta p.$$

Írjuk a fenti egyenletrendszer a szokásos $\dot{\alpha} = A_s \alpha$ mátrix-alakban, ekkor az A_s mátrixra adódik

$$A_s = \begin{pmatrix} C_n(n_s + p_{ts} + n_1); & -C_n(n_s + n_1) \\ -C_p(p_s + p_1); & C_p(p_s + n_{ts} + p_1) \end{pmatrix} \quad (152)$$

A karakterisztikus egyenlet: $\lambda_s^2 - T(A_s)\lambda_s + D(A_s) = 0$, ahol $T(A_s)$ az A_s mátrix spurja, $D(A_s)$ a determinánsa. Esetünkben:

$$T(A_s) = C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1) + C_n p_{ts} + C_p n_{ts}$$

$$D(A_s) = C_n C_p [(p_s + p_1)p_{ts} + (n_s + n_1)n_{ts}] + C_n C_p p_{ts} n_{ts}$$

A két élettartam

$$\frac{1}{\tau_{rs}} \equiv \lambda_{rs} = \frac{T(A_s) \left[1 - \sqrt{1 - \frac{4D(A_s)}{T(A_s)^2}} \right]}{2}; \quad \frac{1}{\tau_{ts}} \equiv \lambda_{ts} = \frac{T(A_s) \left[1 + \sqrt{1 - \frac{4D(A_s)}{T(A_s)^2}} \right]}{2}$$

Könnyű belátni, hogy mivel általában $D(A_s) \ll T(A_s)^2$ az élettartamra érvényes a következő közelítés:

$$\tau_{rs} \approx \frac{T(A_s)}{D(A_s)}; \quad \tau_{ts} \approx \frac{1}{T(A_s)}$$

Végül tehát a stacioner állapotban az élettartamok a következők lesznek:

$$\tau_{rs} = \frac{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1) + C_n p_{ts} + C_p n_{ts}}{C_n C_p [(p_s + p_1)p_{ts} + (n_s + n_1)n_{ts}] + C_n C_p p_{ts} n_{ts}}$$

$$\tau_{ts} = \frac{1}{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1) + C_n p_{ts} + C_p n_{ts}}$$

Térjünk most át a rekombinációs centrumok kis koncentrációjára. Ekkor azokat a tagokat, ahol a $C_n p_{ts}$, $C_p n_{ts}$ magukban, vagy egymással szorozva állnak elhagyhatjuk, s kapjuk:

$$\tau_{rs} = \frac{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)}{C_n C_p [(p_s + p_1)p_{ts} + (n_s + n_1)n_{ts}]}; \quad \tau_{ts} = \frac{1}{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)} \quad (153)$$

Fejezzük ki most a p_{ts} és n_{ts} mennyiségeket a (150) egyenlet alapján. Az egyszerű átalakítások után kapjuk:

$$\tau_{rs} = \frac{C_n(n_s + n_1) + C_p(p_s + p_1)}{C_n C_p N_t(n_s + p_s) - G_0(C_n + C_p)} \quad (154)$$

A (153) és (154) formulákból egyszerűen adódnak az $S-R$ modell megfelelő élet-tartamai, ha $p_s \rightarrow p_0$, $n_s \rightarrow n_0$, s természetesen $G_0 = 0$ -t helyettesítünk:

$$\tau_{r0} = \frac{C_n(n_0 + n_1) + C_p(p_0 + p_1)}{C_n C_p N_t(n_0 + p_0)} \quad (155)$$

$$\tau_{t0} = \frac{1}{C_n(n_0 + n_1) + C_p(p_0 + p_1)} \quad (156)$$

Itt megjegyezzük, míg a (153) a (156)-ból, $p_0 \rightarrow p_s$, $n_0 \rightarrow n_s$ helyettesítéssel, adódik ugyanez a (155) és (154) vonatkozásában nem érvényes, mivel (154) nevezőjében a $G_0(C_p + C_n)$ is szerepel. A „háttér” (stacioner kezdeti feltétel) hatását a fentiek alapján különböző feltételek mellett diszkutálhatjuk. Tekintsünk az egyszerűség kedvéért egy n típusú félvezetőt: p_0 ekkor elhanyagolható. Ha a rekombinációs centrum a tilos sáv felett van, akkor p_1 is kicsiny. A kvalitatív képhez elegendő azt az esetet nézni, amikor $C_n = C_p = C_0$. Ekkor τ_{rs} nem túl nagy, $\delta n_s \equiv n_s - n_0$ -nál $\left(\frac{\delta n_s}{n_0} < 1\right)$ így írható:

$$\tau_{rs} = \tau_{r0} \frac{1 + \frac{2\delta n_s}{n_0 + n_1}}{1 + \frac{2\delta n_s}{n_0 + n_1} \frac{n_1}{n_0}}$$

ahol felhasználtuk a (155) egyenletet. A tört viselkedése a δn_s függvényében az $\frac{n_1}{n_0}$ értékétől függ, ha

a) $\frac{n_1}{n_0} \ll 1$, ami azt jelenti, hogy a trap nívó az aktuális Fermi nívó alatt van, akkor

$$\tau_{rs} \approx \tau_{r0} \left(1 + \frac{2\delta n_s}{n_0}\right)$$

vagyis τ_{rs} növekszik, míg

$$b) \quad \frac{n_1}{n_0} \gg 1 \text{ esetén}$$

$$\tau_{rs} \approx \tau_{r0} \left(1 - \frac{2\delta n_s}{n_0} \right)$$

vagyis τ_{rs} csökken.

A τ_{ts} ezzel szemben az $\frac{n_1}{n_0}$ hányados értékétől függetlenül csökken, lévén

$$\tau_{ts} = \tau_{t0} \frac{1}{1 + \frac{2\delta n_s}{n_0 + n_1}}$$

A fentiekben megvizsgáltuk, tudomásunk szerint először az irodalomban a stacioner állapothoz való visszaállás *kinetikáját*, azaz a τ_{ts} -t és τ_{rs} -t egyaránt. Segítségével lehetőség nyílik a τ_{rs} és τ_{ts} méréséből a tranziens és stacioner élettartam szétválasztására, ha az a) esetet állítjuk be, pl. a hőmérséklet változtatásával, az egyensúlyi

Fermi nívó eltolásával $\left(\frac{n_1}{n_0} \ll 1 \text{ kell legyen} \right)$. Egyszerű számítás mutatja, hogy a szokásos nagy-jelű $S-R$ élettartamhoz képest (lásd (13) formulát) a (154) érzékenyebben függ δn_s -től, mint (13) a Δn -től. Ez a (154)-ben fellépő G_0 -nak tulajdonítható. Ennek kísérleti kimutatása, a fenti elmélet ellenőrzése, könnyen megvalósíthatónak látszik.

11. Az eredmények diszkussziója

A dolgozat problémaköre a rekombináció és $g-r$ zaj fenomenologikus tárgyalása volt. A két problémakör egységes vizsgálatára az irreverzibilis termodinamika nyújtott lehetőséget. Az itt használt formalizmus alapvető feltevése volt, hogy a rendszer homogén (diffúzió elhanyagolható), térfogati rekombinációról, ill. zajról van szó, és végül, a rendszer elegendő közel van az egyensúlyhoz. Ez utóbbi feltevés alapján az A mátrixot a rekombinációt leíró differenciálegyenlet-rendszer linearizálásával kaptuk meg, másrészt a Green—Callen disszipációs fluktuációs tétel is a lineáris elmélet következménye.

A jelen fenomenologikus elmélet, természetesen nem határozza meg egyértelműen a rekombináció atomszerkezeti modelljét. Ezt fenomenologikus elmélettől nem lehet várni. Más szóval a jelen módszer a befogási paramétereket adott állapotoknak tekinti, függetlenül attól, hogy pl. sugárzásos vagy phonon emisszióval kísért átmenettel lehet adott esetben a befogási állandók értékét helyesen meghatározni. Így a fenomenologikus elmélet keretébe pl. a rácsrezgések figyelembe vétele explicit nem szükséges. Ez onnan is látható, hogy jelen elmélet 10^{-9} sec-nál nagyobb időállandójú relaxációkkal foglalkozik, míg az elektron-phonon kölcsönhatás τ relaxációs ideje kisebb mint 10^{-11} sec.

A dolgozatban használt modell: a több-elektronos, több-gerjesztett nívóval rendelkező centrumok, több olyan kérdést vet fel, amelynek kvantitatív megválaszolására már kivezet a fenomenologikus elmélet kereteiből. Itt elsősorban nem az vetődik fel, hogy miért ilyen típusú centrumokat tételezünk fel, erre a kérdésre a 2.

pontban válaszoltunk, hivatkozva bizonyos kísérleti eredményekre és a régebbi modellek elégtelenségére. A probléma inkább a gerjesztett állapotok egzisztálásában van. Más szóval, milyen feltételek teljesülése mellett létezhetnek gerjesztett nívók, hogyan lehet ezeket meghatározni stb. Ebből a szempontból három fajta centrumot kell megvizsgálni: a semleges centrumokat, a pozitív (vagy vonzó) és negatív (vagy taszító) centrumokat. Semleges centrumokra vonatkozóan Boncs—Bruevics és Glasko és újabban Kurszkij végeztek számításokat. Modelljük lényeges vonása az volt, hogy a rekombináldó elektron polarizálja a semleges atomot és ebben a polarizációs potenciálban, amint azt a vonatkozó Schrödinger egyenlet mutatta, kialakulhatnak kötött állapotok, azaz gerjesztett nívók. Könnyebb a helyzet a vonzó centrumok esetén. A számítások különösen sekély donor nívók esetén megbízhatóak és az effektív tömeges közelítéssel nyert hidrogénszerű nívók és a nívók közti egy-phononos átmenetek a befogási hatáskeresztmetszetek helyes nagyságrendjéhez vezetnek. Így pl. *Beleznay F.* és *Pataki G.* [Phys. status solidi 131, 499, 1966] dolgozatukban az alacsony gerjesztési nívók közti átmeneteket véve figyelembe, a rekombinációt diszkrét Markov folyamatnak tekintik és ezzel az elektron-donor rekombináció élettartamára helyes értéket kapnak.

A negatív, vagy taszító centrumok gerjesztett nívóinak létezése mögött az a kísérleti tény áll, hogy olyan rekombinációs centrumok, mint pl. Cu^- , Au^- (germániumban) igen nagy $\sigma_e = 10^{-15} \text{ cm}^2$ hatáskeresztmetszeteket adnak. Ennek értelmezésére elsőnek Nagae mutatott rá, amikor megmutatta, hogy jóllehet taszító centrum esetén nem várhatjuk gerjesztett nívók létezését az elektron számára, azonban a centrum és a lokalizált töltéshordozók összességére nézve ez elképzelhető. Valóban, pl. egy háromszoros akceptorról tételezzük fel, hogy éppen két elektront tartalmaz. Akkor ez az állapot felfogható úgy, mint egy $-3e$ töltésű centrum, amelyen egy lyuk van lokalizálva. Hasonlóan, ha ugyanezen a centrumon csak egyetlen elektron van, akkor ez az állapot úgy tekinthető, mint a $-3e$ állapot két lokalizált lyukkal. A lyukakra nézve azonban a centrum vonzó és így a gerjesztett nívók létrejöhetnek. A dolgozat jelöléseivel élve ez azt jelenti, hogy a $[2, j]$, $[1, j]$ állapotok létezhetnek és létrejöhet ily módon az $[1, j] \rightarrow [2, j]$ átmenet is, most már a vezetési sávban levő elektron befogására nézve.

Az alkalmazásnál tárgyalt modellnél elhanyagolást jelentett az, hogy csak a gerjesztett állapotokon keresztül történő rekombinációt vettük figyelembe, elhanyagoltuk pl. a gerjesztett állapotban levő centrum esetén az alapállapotba való befogás valószínűségét. Itt hivatkoztunk Nagae munkájára, aki megbecsülte a különböző befogások valószínűségét és azt találta, hogy az alapállapotban levő centrum nagyobb valószínűséggel fog be (valamely gerjesztett állapotára) elektront mintha már eleve gerjesztett állapotban lenne. Ennek pontos kimutatása csak a rekombináldó elektron és a rekombinációs centrum hullámfüggvényeinek ismeretében volna lehetséges. Ennek hiányában két körülményt említünk, amelyek plauzibilissé teszik a fenti állítást. Az egyik körülmény, hogy az $[s-1, h]$ állapotú elektron (esetleg lokalizált lyuk) és a rekombináldó elektron kölcsönhatása (pl. Auger-típusú kölcsönhatása) akkor lesz nagyobb, ha $h \gg 1$ és a gerjesztett nívók elég sűrűn helyezkednek el egymáshoz, azaz a bejövő elektron könnyen ionizálhatja, esetleg más kvantumállapotba viszi át az $[s-1, h]$ állapotú elektront. A másik megjegyzésnél, egyszerű hidrogénszerű modellből indulunk ki. Ahhoz, hogy egy elektron pl. egy ionizált donoron rekombináldjék a befogáson kívül még az is kell, hogy az atomon végül is megtapadva maradjon. Ez azt jelenti, hogy a különböző nívókra

vonatkozó befogási keresztmetszeteket még a megtapadási valószínűséggel („sticking probability”) súlyozni kell. Meg lehet mutatni, hogy ez a valószínűség az „ n ”-főkvantumszámmal, annak növekedésével gyorsan csökken. Még rohamosabb ez a csökkenés, ha az „1” mellék kvantumszámot is figyelembe vesszük. Várható, hogy ez a kép, melyet hidrogénszerű modellnél az említett dolgozatban megmutattunk, nem hidrogénszerű centrumokra is érvényes lesz.

A dolgozatban kapott eredmények kísérleti ellenőrzése több vonatkozásban is reálisnak látszik. A stacioner állapothoz történő rekombináció egy esetleg több centrum jelenléte esetén a „stacioner” és „egyensúlyi” élettartamok különbségéhez vezethet. Felületi centrumok esetében, hasonló jelenségeket *Lőrinczy A.* vizsgál az MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézetben. A gerjesztett nívók létezése a lumineszcencia területén is várhatóan igazolást nyer, ami a lumineszcencia kinetikájának vizsgálatát teszi szükségessé. CdS esetén az élettartam hőmérséklet-függése, mint Seikman és munkatársai kísérlete megmutatta, éppen a gerjesztett nívók létezésére utal.

A jelen fenomenologikus elmélet mellett, amelyre a kísérletek kiértékelésénél mindig szükség lesz, felmerül az igény, hogy a rekombináció jelenségét, hasonlóan a többi transzportjelenségekhez, mélyebb elmélet kereteiben fogalmazzák meg. Erre a legmegfelelőbbnek látszik a *Kubó* által kidolgozott lineáris válasz elmélet („linear response theory”), de egy ilyen program keresztül vitele még további, a meglevőknél mélyebb vizsgálatokat igényel. Nem kétséges azonban, hogy egy ilyen elmélet kidolgozása a rekombináció elemi folyamatainak jobb megértéséhez, és a jelenlegi fenomenologikus elmélet érvényességi határának pontosabb megfogalmazásához fog vezetni.

Appendix I.

A mátrix-függvények kanonikus felbontása

Az alábbiakban ismertetjük a mátrix elmélet egyik tételét, mely mátrixok függvényeire (mátrix-függvényekre) vonatkozik, [30]. Egy n -ed rendű kvadratikus A mátrix $f(A)$ függvényét úgy definiáljuk, mint az

$$S_N(A) = \sum_{k=0}^N C_k A^k$$

részletösszegek limeszét, ha az $N \rightarrow \infty$ -hez. Vagyis, ha a fenti határérték létezik, akkor

$$f(A) = \lim_{N \rightarrow \infty} S_N(A) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{k=0}^N C_k A^k$$

Fontos felismerés, hogy a fenti határátmenet skalár mennyiségen történő határátmenetre vihető át. Ehhez lényegében az A mátrix karakterisztikus egyenletének gyökeit kell ismerni. Legyenek $L_k(x)$ -ek az ún. n -ed rendű Lagrange-féle alappolinomok (feltesszük, hogy az A mátrix karakterisztikus egyenletének csupa egyszeres gyöke van; mivel ez számunkra teljesen elegendő) és essenek a karakterisztikus egyenlet $(k=1, \dots, n)$ gyökei az $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k z^k$ sor konvergencia körébe. Ekkor érvényes

az $f(A)$ mátrix-függvény következő ún. kanonikus felbontása:

$$f(A) = \sum_{k=1}^n f(\lambda_k) L_k(A) \quad (\text{AI-1})$$

Az $L_k(x)$, $(k-1)$ -ed rendű interpolációs $(k=1, \dots, n)$ Lagrange-féle alapolinom definíciója a következő: az x_k helyen értéke 1, az összes többi x_i $(i \neq k)$ helyen zérus:

$$L_k(x_i) = \delta_{ki} \quad (\text{AI-2})$$

Belátható, hogy explicite a következő kifejezés adódik, az $L_k(x)$ -ekre:

$$L_k(x) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_k)(x-x_k)} \quad (\text{AI-3})$$

ahol $\omega(x) = \prod_{k=1}^n (x-x_k)$.

Érvényes nyilván a

$$\sum_{k=1}^n L_k(x) \equiv 1 \quad (\text{AI-4})$$

összefüggés, ami a mátrixokra alkalmazva a

$$\sum_{k=1}^n L_k(A) \equiv 1 \quad (\text{AI-5})$$

kifejezést adja.

Ha speciálisan az A élettartam-mátrix másodrendű és karakterisztikus egyenletének gyökei $\frac{1}{\tau_r}$ és $\frac{1}{\tau_t}$, akkor az interpoláló Lagrange polinomok elsőrendűek, értékük:

$$L_r(x) = -\frac{\tau_r \tau_t}{\tau_r - \tau_t} \left(x - \frac{1}{\tau_t} \right); \quad L_t(x) = +\frac{\tau_r \tau_t}{\tau_r - \tau_t} \left(x - \frac{1}{\tau_r} \right) \quad (\text{AI-6})$$

Ez alapján

$$f(A) = f\left(\frac{1}{\tau_r}\right) L_r(A) + f\left(\frac{1}{\tau_t}\right) L_t(A) \quad (\text{AI-7})$$

Végül $n=4$ esetén, az interpoláló Lagrange-féle alapolinomok harmadrendűek lesznek. Jelölje az A mátrix karakterisztikus egyenletének gyökeit $\frac{1}{\tau_r}, \frac{1}{\tau_t}, \frac{1}{\tau_3}, \frac{1}{\tau_4}$ (lásd (142)–(144) formulák), ekkor az (AI-3) alapján írhatjuk:

$$\begin{aligned} \omega'(x_r) &= \left(\frac{1}{\tau_r} - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(\frac{1}{\tau_r} - \frac{1}{\tau_3} \right) \left(\frac{1}{\tau_r} - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ \omega'(x_t) &= \left(\frac{1}{\tau_t} - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(\frac{1}{\tau_t} - \frac{1}{\tau_3} \right) \left(\frac{1}{\tau_t} - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ \omega'(x_3) &= \left(\frac{1}{\tau_3} - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(\frac{1}{\tau_3} - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(\frac{1}{\tau_3} - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ \omega'(x_4) &= \left(\frac{1}{\tau_4} - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(\frac{1}{\tau_4} - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(\frac{1}{\tau_4} - \frac{1}{\tau_3} \right) \end{aligned} \quad (\text{AI-8})$$

és így az $L_i(x)$ -ekre ($i=r, t, 3, 4$) kapjuk:

$$\begin{aligned} L_r(x) &= \frac{1}{\omega'(x_r)} \left(x - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_3} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ L_t(x) &= \frac{1}{\omega'(x_t)} \left(x - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_3} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ L_3(x) &= \frac{1}{\omega'(x_3)} \left(x - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_4} \right) \\ L_4(x) &= \frac{1}{\omega'(x_4)} \left(x - \frac{1}{\tau_r} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_t} \right) \left(x - \frac{1}{\tau_3} \right) \end{aligned} \quad (\text{AI-9})$$

Az (AI-9) segítségével a negyedrendű A mátrix $f(A)$ függvénye így bontható fel

$$f(A) = f\left(\frac{1}{\tau_r}\right) L_r(A) + f\left(\frac{1}{\tau_t}\right) L_t(A) + f\left(\frac{1}{\tau_3}\right) L_3(A) + f\left(\frac{1}{\tau_4}\right) L_4(A) \quad (\text{AI-10})$$

Appendix II.

A Green—Callen disszipációs fluktuációs theorema levezetése több változó esetében

A dolgozat 6. pontjában ismertettünk egy levezetést a Green—Callen disszipációs fluktuációs theoremára. Ott lényeges volt, hogy a zajprobléma a $W(I(0), I(t))$ eloszlás második momentumának meghatározására vezethető vissza. A zajspektrumnak a rendszert jellemző g, L mátrixok segítségével történő kifejezése annak alapján történt, hogy a fluktuáló mennyiségekről, feltételeztük, hogy Markov-folyamatot képeznek, valamint azt, hogy a fluktuáló mennyiségek makroszkópikus egyenleteknek tesznek eleget. Ennek alapján kapjuk a (80) formulát a $G(f)$ -re. Ezután a Green—Callen theorem levezetése úgy történt, hogy egy makroszkópikus perturbációra meghatároztuk a rendszer „válaszát”, s ha megfelelő „admittanciát” definiálunk, akkor a (80)-nal történő összevetésből adódott az $\omega^2 G(\alpha, f) = -4kT \operatorname{Re} Y(\omega)$ összefüggés, a Green—Callen theorem.

K. M. Van Vliet a [37] dolgozatában egyváltozós esetben vezeti le a Green—Callen theoremát oly módon, hogy *közvetlenül* az ún. Langevin egyenletből indul ki. A több változós esetet igen bonyolult úton [39] egy főtengetly transzformáció segítségével oldja meg. A spektrum frekvenciafüggésére is csak így kap bepillantást. Az alábbiakban a főtengetly transzformáció helyett az (AI-2)-ben idézett mátrixfüggvények kanonikus felbontását használjuk, és a *mátrix írásmód ellenére* azonnal látható a zaj frekvencia spektrumának jellege is. A Langevin egyenlet (81) egyenletből úgy nyerhető, ha a $\frac{P}{T}$ erőt egy véletlen erővel helyettesítjük, azaz:

$$L^{-1}\alpha = -g\alpha + \mathcal{E}(t). \quad (\text{AII-1})$$

Átlagoljuk most az (AII-1)-et egy olyan feltételes valószínűségi mezőn, amely az

α_0 kezdeti feltételt rója ki az $\alpha(t)$ -re. Az átlagolást $\langle \rangle_{\alpha_0}$ -val jelölve, kapjuk:

$$L^{-1} \frac{d\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0}}{dt} = -g \langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} \quad (\text{AII-2})$$

Ennek az egyenletnek megoldása a véletlen „ α_0 -jú fluktuációk” regressziója:

$$\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} = e^{-At} \alpha_0 \quad (\text{AII-3})$$

ahol, mint az előzőekben is $A \equiv Lg$.

A korrelációs függvényt most úgy kapjuk meg, ha (AII-3)-at megszorozzuk α -val és átlagolunk egy különböző α_0 -kal bíró sokaságra. Ha ezt az átlagolást —al jelöljük, kapjuk:

$$\overline{\langle \alpha(t) \rangle_{\alpha_0} \tilde{\alpha}_0} = e^{-At} \overline{\alpha_0 \tilde{\alpha}_0} \quad (\text{AII-4})$$

A Wiener—Hincsin formula szerint (lásd (66) formula) a zajspektrumot a korrelációs függvény Fourier transzformáltja adja. Írhatjuk tehát:

$$G(\alpha, f) = 4 \int_0^{\infty} \overline{\langle \alpha(\tau) \rangle_{\alpha_0} \tilde{\alpha}_0} \cos \omega \tau d\tau \quad (\text{AII-5})$$

Ha feltesszük, hogy az A mátrixnak csupa egyszerű gyöke van, akkor az (AII-4)-ben szereplő e^{-At} -t az (AI-1) alapján így írhatjuk

$$e^{-At} = \sum_{i=1}^n e^{-\lambda_i \tau} L_i(A)$$

Kapjuk tehát

$$G(\alpha, f) = 4 \int_0^{\infty} \sum_{j=1}^n e^{-\lambda_j \tau} L_j(A) \overline{\alpha_0 \tilde{\alpha}_0} \cos \omega \tau d\tau = 4k \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i L_i(A)}{\lambda_i^2 + \omega^2} g^{-1} \quad (\text{AII-6})$$

ahol felhasználtuk a $\overline{\alpha_0 \tilde{\alpha}_0} = kg^{-1}$ összefüggést (lásd (75) formulát), valamint hogy:

$$\int_0^{\infty} e^{-\lambda_i \tau} \cos \omega \tau d\tau = \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \omega^2}$$

Az (AII-6) a feladat egy részének megoldását jelenti, ugyanis a mátrix írásmód ellenére mutatja a frekvenciafüggést. Látható, hogy a változók számának növelésével az egyes relaxációs időknek megfelelő tag általában a $G(\alpha, f)$ minden komponensében fellép, de az is látható, hogy ezek simán függenek az ω frekvenciától, azaz a spektrumban nem várhatók „kiugrások”. Integráljuk most $G(\alpha, f)$ -et a frekvenciára, akkor kapjuk

$$\int_0^{\infty} G(\alpha, f) df = 4k \sum_{i=1}^n \int_0^{\infty} \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \omega^2} df L_i(A) g^{-1} = kg^{-1} \quad (\text{AII-7})$$

ahol felhasználtuk az (AI-5) összefüggést.

A továbbiakban most már a 6. ponthoz hasonlóan járunk el. Definálni kell a rendszer admittanciáját. A különbség az lesz, hogy azonnal a reális részre szorítunk, és egy $\sigma(\omega)$ konduktanciát vezetünk be.

A $\sigma(\omega)$ definíciójához a Langevin egyenlet helyett ismét a (81) egyenletekhez kell fordulni. Ha $\frac{P}{T}$ -t $V(t)$ -vel jelöljük, akkor a $\sigma(\omega)$ -ra a következő definíciót írhatjuk fel:

$$\sigma(\omega) = \text{Re} \left(\frac{j\omega \text{ Fourier komponens } \alpha(t)}{\text{Fourier komponens } V(t)} \right)$$

A (81) alapján, vagy közvetlen (83)-ból

$$\sigma(\omega) = (A^2 + \omega^2)^{-1} A g^{-1} \omega^2 \quad (\text{AII-8})$$

A Green—Callen theoremata bizonyításához képezzük a $\int_0^\infty 4k \omega^{-2} \sigma(\omega) d\omega$ integrált, kapjuk:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty 4k \omega^2 \sigma(\omega) d\omega &= \frac{4k}{2\pi} \int_0^\infty (A^2 + \omega^2)^{-1} A g^{-1} d\omega = \frac{4k}{2\pi} \int_0^\infty \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \omega^2} L_i(A) g^{-1} d\omega = \\ &= \frac{4k}{2\pi} \sum_{i=1}^n \int_0^\infty \frac{\lambda_i}{\lambda_i^2 + \omega^2} d\omega L_i(A) g^{-1} = k \sum_{i=1}^n L_i(A) g^{-1} = k g^{-1} \end{aligned}$$

Ez az összefüggés, figyelembe véve az (AII-6) és (AII-7) összefüggéseket, mutatja hogy

$$\omega^2 G(\alpha, f) = 4kT \text{Re } Y(\omega) = 4k\sigma(\omega) \quad (\text{AII-9})$$

azaz a Green—Callen disszipációs fluktuációs theoremata.

Irodalom

1. *W. Shockley and W. T. Read*, Phys. Rev. 87, 835, 1952.
2. *R. N. Hall*, Phys. Rev. 87, 387, 1952.
3. *W. van Roosbroeck and W. Shockley*, Phys. Rev. 94, 1558, 1954.
4. *A. Rose*, Phys. Rev. 97, 322, 1955.
5. *A. Rose*, Proc. I. R. E., 43, 1850, 1955.
6. *J. A. Burton, G. G. Hull, F. J. Morin and J. C. Severiens*, J. Phys. Chem., 57, 853, 1953.
7. *Sz. M. Růvkin*, Puluprovodnyiki v nauke i tyehnyike, T. II. gl. 22, 1958.
8. *S. G. Kalashnikov*, Journ. Techn. Phys. USSR. 26, 241, 1956.
9. *P. T. Landsberg*, Proc. Phys. Soc. (London) B70, 282, 1957.
10. *H. H. Woodbury and W. W. Tyler*, Phys. Rev. 105, 84, 1957.
11. *C. B. Collins et al.* Phys. Rev. 105, 1168, 1957.
12. *W. Shockley and J. T. Last*, Phys. Rev. 107, 342, 1957.
13. *P. T. Landsberg*, Proc. Phys. Soc. (London) B69, 1056, 1956.
14. *P. T. Landsberg*, Solid State Physics in Electronics and Telecommunication, Academic Press, 1960, pp. 436—455.
15. *Chin-Tang Sah and W. Shockley*, Phys. Rev. 109, 1103, 1958.
16. *A. R. Beattie and P. T. Landsberg*, Proc. Roy. Soc. A249, 16, 1958.
17. *Goodman et al.* Phys. Rev. 71, 191, 1947.
18. *M. Lax*, Phys. Rev. 119, 1502, 1960.
- 18a. *G. Ascarelli and S. Rodriguez*, Phys. Rev. 124, 1321, 1961.
- 18b. *P. R. Haman and A. L. McWhorter*, Phys. Rev. 134, A 250, 1964.
19. *V. L. Boncs-Bruevics and V. B. Glasko*, Soviet Phys. Solid States 4, 510, 1962.

20. Yu. V. Gulyaev, Sov. Phys.-Solid States 3, 279, 1961.
21. A. V. Rzsanov, Sov. Phys.-Solid States 3, 3691, 1961.
22. M. Nagae, Journ. Phys. Soc. Jap. 18, 207, 1963.
23. D. J. Sandiford, Phys. Rev. 105, 524, 1957.
24. G. K. Wertheim, Phys. Rev. 109, 1086, 1958.
- 24a V. L. Boncs-Bruevics, Zs. T. F. 28, 67, 1958.
25. G. Pataki, Acta Phys. Hung. 16, 29, 1963.
26. K. C. Nomura and I. S. Blakemore, Phys. Rev. 112, 607, 1958. és Phys. Rev. 121, 734, 1961.
27. I. Fényes, Acta Phys. Hung. 11, 131, 1960. és I. Fényes, Z. Physik, 134, 95, 1952.
28. S. R. deGroot, Thermodynamics of Irreversible Processes, Amsterdam, North Holland P. C. 1952.
- S. R. deGroot and P. Mazur, Nonequilibrium Thermodynamics, North Holland P. C. Amsterdam, 1962.
29. I. Prigogine, Introduction to Thermodynamics of Irreversible processes (Orosz nyelvű kiadás: I. L. Moszkva, 1960).
30. Rózsa P.: Matematika, Országos Atomenergia Bizottság, Atomtechnikai Tanfolyam, 1960. Budapest.
- Egerváry J. MTA III. oszt. Közlemények, 3, 417, 1953.
31. G. Pataki, Acta Phys. Hung. 13, 311, 1961.
32. G. Pataki, Acta Phys. Hung. 12, 311, 1960.
33. M. Lax, Rev. of Modern Phys. 32, 25, 1960.
34. R. F. Green and M. B. Callen, Phys. Rev. 83, 1231, 1951.
35. R. F. Green and H. B. Callen, Phys. Rev. 88, 1378, 1952.
36. H. B. Callen and R. F. Green, Phys. Rev. 86, 702, 1958.
37. K. M. van Vliet, Phys. Rev. 109, 1021, 1958.
38. Termodinamika dei processi irreversibili, Bologna, 1960. cikkgyűjtemény.
39. K. M. van Vliet, Phys. Rev. 110, 50, 1958.
40. D. A. Evans and P. T. Landsberg, Proc. Roy. Soc; A257, 464, 1962.
- P. T. Landsberg and D. A. Evans, Conference on Photoconductivity Pergamon Press, New York, 1962.
41. T. Hill, Statistical Mechanics, McGraw-Hill BC, INC. New York, 1956.
42. G. Pataki, VII-th International Conference on the Physics of Semiconductors, Paris 1964, Dunod.
43. A. V. Rzsanov, Sov. Phys.- Solid States 4, 1279, 1962

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Technikai szerkesztő: Turchányi György

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Merkly László

A kézirat beérkezett: 1967. VIII. 8. – Példányszám: 550 – Terjedelem: 9,4 (A/5) ív

67-5708 Szegedi Nyomda

MTA Könyvtára
474 /1968.
Periodika

A MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK
OSZTÁLYÁNAK

KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet)

A közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 42 Ft, külföldi címre 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, Budapest, V., Alkotmány u. 21. (Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám 05-915-111-46), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, Budapest, I., Fő utca 32.

(Magyar Nemzeti Bank egyszámlaszám:
43-790-057-181) útján eszközölhetők

Ára: 10,— Ft.

Előfizetés kötetenként: 42,— Ft

INDEX: 26.491

TARTALOMJEGYZÉK

	Oldal
<i>Györgyi Géza:</i> Elfajult kvantummechanikai sajátértékfeladatok	505
<i>Pataki György:</i> A rekombináció és a generáció-rekombináció zaj irreverzibilis termodinamikai elméletéről félvezetőkben	551

A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XIV. KÖTETÉNEK TARTALOMJEGYZÉKE

<i>Pócsik György</i> : A kvantum térelmélet alapelvei és legújabb eredményei III.	1
<i>Kovács István és Chatel Péter</i> : Diszlokációk kontinuum elmélete III.	15
<i>Solt György</i> : Kristályok dinamikájának vizsgálata lassú neutronok szórásával	89
<i>Veres Árpád</i> : A ^{60}Co gamma-sugaraival előállított magizomér hatáskeresztmetszetek kísérleti körülményektől való függésének vizsgálata	143
<i>Zámori Zoltán</i> : Gyors koincidenciakör és időfelbontás	161
<i>Bitó János</i> : Kisülések szondamérései I. Egyenáramú szondamérések	185
<i>Hédervári Péter</i> : A Föld belső szerkezetéről. III.	223
<i>J. A. Szmorogyinszkij</i> : Az elemi részek unitér szimmetriája	233
<i>Bitó János</i> : Kisülések szondamérései II.	297
<i>Daróczy Sándor</i> : Proton-emisszióval járó radioaktív átalakulások	317
<i>Pintér Ferenc</i> : Molekulák közötti kölcsönhatások vizsgálata a Raman spektroszkópia mód- szerével	341
<i>Somogyi Antal</i> : A kozmikus sugárzás kiterjedt légizáporainak részecskeszám szerinti eloszlása nagy részecskeszám esetén	377
<i>Kertész László és Tóth Gábor</i> : A bizmut-antimon rendszerről	441
<i>Malicskó László</i> : Oldatból való kristályosodáskor fellépő növekedési sebességingadozások vizsgálata	447
<i>Binder Gyula és Kiss Gábor</i> : Jelalakdiszkriminációs plasztik előállítása és vizsgálata	457

A III. MAGYAR ELMÉLETI FIZIKAI NYÁRI ISKOLA 1965 ELŐADÁSAI

<i>Dolinszky Tamás</i> : A potenciálszórás alapfeladata	487
<i>Nyíri Júlia</i> : A szórási amplitúdó analitikus tulajdonságai	511
<i>Kövesy Zsuzsa</i> : A küszöbjelenségek	529
<i>Huszár Miklós</i> : A nukleon-alakfaktorok	545
<i>Telbisz Ferenc</i> : A Born-közelítés és finomításai	555
<i>Boschán Péter</i> : Az impulzus-közelítés a szórásszámításban	563
<i>Kosály György és Solt György</i> : A lassú neutronok szóródása kristályon és folyadékon	571

A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan</i> : A kvantummechanikáról II.	35
<i>P. A. M. Dirac</i> : A kvantummechanika alapegyenletei	171
<i>W. Pauli</i> : A hidrogénszínképről az új kvantummechanika szempontjából	271
<i>E. Schrödinger</i> : A Heisenberg—Born—Jordan-féle kvantummechanika viszonya az enyémhez	359
<i>Max Born</i> : Az ütközési folyamatok kvantummechanikája	463
<i>R. P. Feynmann</i> : A nemrelativisztikus kvantummechanika felépítése a téridőben	595

KÖNYVISMERTETÉS

<i>Robert H. Dicke and James P. Wittke</i> : Introduction to Quantum Mechanics (Györgyi Géza)	87
<i>Fenyves E, Haiman O.</i> : Die Physikalischen Grundlagen der Kernstrahlungsmessungen (Kirschner István)	375

NÉVMUTATÓ

<i>Binder Gyula és Kiss Gábor: Jelalakdiszkriminációs plasztik előállítása és vizsgálata</i>	457
<i>Boschán Péter: Az impulzus-közelítés a szórásszámításban</i>	563
<i>Chatel Péter: lásd Kovács István</i>	
<i>Daróczy Sándor: Proton-emisszióval járó radioaktív átalakulások</i>	317
<i>Bitó János: Kisülések szondamérései I. Egyenáramú szondamérések</i>	185
<i>Bitó János: Kisülések szondamérései II.</i>	297
<i>Max Born: Az ütközési folyamatok kvantummechanikája</i>	463
<i>M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan: A kvantummechanikáról II.</i>	35
<i>P. A. M. Dirac: A kvantummechanika alapegyenletei</i>	171
<i>Dolinszky Tamás: A potenciálszórás alapfeladata</i>	487
<i>R. P. Feynmann: A nemrelativisztikus kvantummechanika felépítése a téridőben</i>	595
<i>W. Heisenberg: Lásd M. Born</i>	
<i>Hédervári Péter: A Föld belső szerkezetéről III.</i>	223
<i>Huszár Miklós: A nukleon-alakfaktorok</i>	545
<i>P. Jordan: lásd Max Born</i>	
<i>Kertész László és Tóth Gábor: A bizmut-antimon rendszerről</i>	441
<i>Kiss Gábor: lásd Binder</i>	
<i>Kovács István és Chatel Péter: Diszlokációk kontinuum-elmélete III.</i>	15
<i>Kosály György és Solt György: A lassú neutronok szóródása kristályon és folyadékon</i>	571
<i>Kövesy Zsuzsa: A küszöbjelenségek</i>	529
<i>Malicskó László: Oldatból való kristályosodáskor fellépő növekedési sebességingadozások vizsgálata</i>	447
<i>Nyíri Júlia: A szórási amplitúdó analitikus tulajdonságai</i>	511
<i>W. Pauli: A hidrogénszínképről az új kvantummechanika szempontjából</i>	271
<i>Pintér Ferenc: Molekulák közötti kölcsönhatások vizsgálata a Raman spektroszkópia módszerével</i>	341
<i>Pócsik György: A kvantumtérelmélet alapelvei és legújabb eredményei III.</i>	1
<i>E. Schrödinger: A Heisenberg—Born—Jordan-féle kvantummechanika viszonya az enyémhez</i>	359
<i>Solt György: Kristályok dinamikájának vizsgálata lassú neutronok szórásával</i>	89
<i>Solt György: lásd Kosály</i>	
<i>Somogyi Antal: A kozmikus sugárzás kiterjedt légizáporainak részecskeszám szerinti eloszlása nagy részecskeszám esetén</i>	377
<i>J. A. Szmorogyinszkij: Az elemi részek unitér szimmetriája</i>	233
<i>Telbisz Ferenc: A Born-közelítés és finomításai</i>	555
<i>Tóth Gábor: lásd Kertész</i>	
<i>Veres Árpád: A ^{60}Co gamma-sugaraival előállított magizomér hatáskeresztmetszetek kísérleti körülményektől való függésének vizsgálata</i>	143
<i>Zámori Zoltán: Gyors koincidenciakör és időfelbontás</i>	161

